

CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA CAMPUS ENSENADA

ESPECTRO CUÁNTICO DE POTENCIALES DE CAMPO CENTRAL Y SU CONEXIÓN CON LA FÓRMULA DEL NÚMERO π DE JOHN WALLIS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

PRESENTA:

Alberto Santiago Solís

TUTOR:

DR. FRANCISCO MIRELES HIGUERA

UNAM, Carretera Tijuana -Ensenada KM 107, Playitas 22860 Ensenada, B.C, 2020





UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

$A\ mis\ abuelos,$	mis padres, mis	hermanos, mi a	sesor, mis amigos, a Mingus y	mi fiel compañe a mi princesa

Prefacio

A finales del 2015, Tamar Friedmann y Carl Hagen de la Universidad de Roschester, Nueva York, reportan la primera derivación de la fórmula de Wallis para el número irracional de π a partir de un problema canónico de mecánica cuántica - el espectro del átomo de hidrógeno -. "Lo maravilloso del asunto, es que pone de manifiesto una admirable conexión entre física y las matemáticas", expresó con entusiasmo Tamar Friedman en una entrevista con Catherine Meyers de la AIP (American Institute of Physics) [1] - "Es fascinante que una fórmula del siglo XVII, caracterice un sistema físico descrito 300 años después". Dicha fórmula, presentada originalmente en 1655 por el matemático inglés John Wallis, consiste en la simple y bella expresión matemática, definida como el producto infinito de la razón del cuadrado de los números pares con los números impares. En su artículo, Quantum Mechanical Derivation of the Wallis formula for π , publicado en el Journal of the Mathematical Physics 56, 112101 (2015); los investigadores de la Universidad de Rochester, utilizan una técnica de mecánica cuántica conocida como cálculo variacional, para aproximarse a los estados de energía cuantizados del átomo de hidrógeno. Por el hecho de que las soluciones exactas del átomo de hidrógeno son conocidas, los autores pudieron determinar el error de su aproximación. Inmediatamente, Hagen se percató de una tendencia irregular, el error disminuía conforme se consideraban estados de mayor energía. Un comportamiento inusual, considerando que el método variacional describe de buena forma estados de mínima energía, a diferencia de estados excitados. Fue a partir del límite clásico del problema, donde se manifestó la fórmula pre-newtoniana para π . "En ningún momento, esperamos encontrar la fórmula de Wallis para π ". - comentó Hagen - "simplemente apareció".

Del trabajo de Friedman y Hagen surge la interrogante, ¿existirán otros sistemas en mecánica cuántica que se relacionen con la fórmula para π de Wallis?, ¿será el átomo de

PREFACIO

hirógeno un caso único de esta fascinate conexión entre el número π descrito por Wallis y sistemas descritos por las leyes de la física cuántica? En este trabajo de tesis reportamos que diferentes problemas con aplicaciones diversas en átomos hidrogenoides, en física de partículas de altas energías, como el potencial quark-antiquark y Pöschl-Teller, se pueden relacionar en efecto con la fórmula de Wallis o tipo Wallis. Adicionalmente se presenta una derivación del número de Euler a partir de un problema de mecánica cuántica, en el límite clásico.

Resumen

En 1655 John Wallis encuentra una simple y elegante expresión exacta para π :

$$\frac{\pi}{2} = \frac{2 \cdot 2}{1 \cdot 3} \frac{4 \cdot 4}{3 \cdot 5} \frac{6 \cdot 6}{5 \cdot 7} \dots$$

Recientemente (2015) Tamar Friedmann y Carl Hagen demuestran una inesperada correlación entre la fórmula matemática de J. Wallis para número irracional de π y el espectro cuántico del átomo de hidrógeno. En esta tesis demostramos que tal conexión de la fórmula de J. Wallis con un problema físico no es única en la naturaleza. Otros potenciales radiales de la forma genérica $V(r) = \sum_{\mu=-2}^{2} a_{\mu} r^{\mu}$ con a_{μ} coeficientes constantes, y que modelan potenciales ampliamente usados en Física de altas energías y teoría de campos, como el intercambio de gluón, confinamiento quark-antiquark y potenciales tipo Pöschl-Teller; presentan la misma relación intrínseca con el número irracional π .

Abstract

In 1655 John Wallis found a simple and elegant exact expression for π

$$\frac{\pi}{2} = \frac{2 \cdot 2}{1 \cdot 3} \frac{4 \cdot 4}{3 \cdot 5} \frac{6 \cdot 6}{5 \cdot 7} \dots$$

Recently (2015) Tamar Friedman and Carl Hagen demostrate an unexpected correlation between the mathematical formula of J. Wallis for the irrational number of π and the quantum spectrum of the hydrogen atom. In this thesis we show that such a connection of the J. Wallis formula with a physical problem is not unique in nature. Other radial potentials of the generic form $V(r) = \sum_{\mu=-2}^{2} a_{\mu} r^{\mu}$ with a_{μ} constant coefficients, that model potentials widely used in high-energy physics and field theory, such as gluon exchange, quark-antiquark confinement and Pöschl-Teller potentials; show the same intrinsic relationship with the irrational number π .

Índice general

Pr	Prefacio		
Re	esum	en	IV
Al	ostra	${f ct}$	V
1.	Intr	oducción	1
	1.1.	El número π	1
	1.2.	John Wallis	3
	1.3.	El átomo de hidrógeno y la fórmula de Wallis	4
2.	Hip	ótesis de la tesis y objetivos	6
	2.1.	Hipótesis	6
	2.2.	Objetivos	7
		2.2.1. Objetivo general	7
		2.2.2. Objetivos específicos	7
3.	Mar	co Teórico	8
	3.1.	Problemas de Campo central	9
	3.2.	Métodos de aproximación	10
		3.2.1. Método Variacional	11
		3.2.2. Método de Nikiforov-Uvarov	12
4.	Der	ivación de Friedmann y Hagen de la fórmula de Wallis para π	14
	4.1.	Metodología de Friedmann v Hagen	14

ÍNDICE GENERAL	VII
n (Bice del (Eluie	V 11

5 .	Der	Perivaciones alternativas de la fórmula de Wallis		
	5.1.	Átomo	o de Hidrógeno: función prueba lorentziana	22
	5.2.	2. Dualidad de la ecuación de Schrödinger		
6.	3. Potenciales de Campo Central			30
		6.0.1.	Quark-Antiquark	30
		6.0.2.	Potencial Pöschl-Teller	35
7.	Res	ultado	s y Análisis	38
	7.1.	Poteno	cial quark-antiquark	38
		7.1.1.	Potencial Quark-Antiquark en el límite $a \to 0 \dots \dots$	39
		7.1.2.	Potencial Quark-Antiquark en el límite $b \to 0 \dots \dots$	40
		7.1.3.	Potencial Quark-Antiquark en el caso general $(a,b\neq 0$)	42
	7.2.	7.2. Potencial quark-antiquark: Confinamiento cuadrático		44
		7.2.1.	Potencial Quark-Antiquark con confinamiento cuadrático en el caso	
			general $(b, c \neq 0)$	45
	7.3.	Interp	retación física del producto de Wallis	46
	7.4.	Anális	is matemático de la fórmula de Wallis	47
		7.4.1.	Fórmula de Wallis en el método de Nikiforov-Uvarov	47
	7.5.	5. La fórmula de Wallis en el átomo de hidrógeno: comportamiento asintótico		
		de la e	ecuación NU	49
	7.6.	La fór:	mula de Wallis en el potencial de Pöschl-Teller	50
		7.6.1.	Fórmula tipo Wallis del potencial Pöschl-Teller: aproximación cua-	
			drática	52
8.	Con	clusio	nes	56
Α.	Solu	ıción d	lel Átomo de Hidrógeno	60
в.	Mét	odo de	e Nikiforov-Uvarov	63
	B.1.	Átomo	o de hidrógeno por el método de NU	66
С.	Fór	mula d	le Stirling para e y límite de la razón de exactitud \mathcal{W}_l	69

ÍNDICE GENERAL	
D. Fórmulas tipo Wallis y el número de Euler	72
D.0.1. Dimensiones pares	74
D.0.2. Dimensiones impares	75
D.0.3. Wallis y Euler	77

Índice de figuras

1.1.	Método de exhuación aplicado a un círculo utilizando a) un cuadrado, b)	
	un pentágono y c) un heptágono	2
4.1.	Cociente entre el valor de expectación obtenido mediante el método varia-	
	cional y la solución analítica cerrada del átomo de hidrógeno. El cociente	
	tiende a la unidad conforme l (número cuántico angular) aumenta de valor.	17
6.1.	Representación pictagórica del a) intercambio de un gluón (similar al inter-	
	cambio de un fotón entre electrones) y b) fenómeno de confinamiento entre	
	un par quark-antiquark. q : quark, \tilde{q} : antiquark, g : gluón, e : electrón, γ : fotón	31
6.2.	Representación pictagórica del potencial $U(r)=ar-\frac{b}{r}$. El intercambio de	
	gluon predomina para $r \to 0,$ el confinamiento quark-antiquark predomina	
	para $r \to \infty.$ Las constantes $a \ge b$ son reales positivos y sus valores dependen	
	de las características y propiedades del quark involucrado	32
6.3.	Representación pictagórica del potencial $U(r) = -\frac{b}{r} + cr^2$. El intercambio de	
	gluon predomina para $r \to 0,$ el confinamiento quark-antiquark predomina	
	para $r \to \infty.$ Las constantes b y c son reales positivos y sus valores dependen	
	de las características y propiedades del quark involucrado	34
6.4.	Representación pictagórica del potencial Pöschl-Teller tipo $-\frac{V_0}{\cosh^2\beta r}$. Po-	
	tencial utilizado para describir puntos cuánticos, oscilaciones anarmónicas,	
	etc. Las constantes V_o y β son la amplitud y frecuencia de la función $\cosh(r)$	
	respectivamente	36

Índice de tablas

6.1.	Espectro de masa del charmonium (GeV) ($m_c = 1.209 GeV, a = 0.2 GeV, b = 0.2 GeV,$	
	$1.244, \delta = 0.231 GeV) \dots \dots$	35
6.2.	Espectro de masa del bott tomonium (en unidades de GeV) ($m_b = 4.823 GeV, a = 4.823 GeV$	=
	$0.2GeV, b = 1.569, \delta = 0.378GeV)$	35
7 1	Espectro energético de diferentes problemes de compo central obtenido mo	
1.1.	Espectro energético de diferentes problemas de campo central obtenido me-	
	diante el método de Rayleigh-Ritz	55

Capítulo 1

Introducción

1.1. El número π

 π es una constante matemática definida como el cociente entre la circunferencia de un círculo y su diámetro. Es un número irracional, ya que no puede ser representado por una razón finita entre números enteros. En consecuencia, su representación decimal es infinita y el orden de aparición de sus decimales no describe ningún tipo de patrón o de aleatoriedad [2]; como referencia los primeros seis dígitos de π son 3.14159. Los registros del uso y estudios referentes a π datan de aproximadamente 4000 años de antigüedad. Existen evidencias donde los Babilonios fueron los primeros en utilizar un valor aproximado de π \approx 3.125. En el antiguo Egipto (1650 a.C.), el documento conocido como el *Rhind Papyrus* es una obra que evidencía el estudio de las matemáticas desde entonces y donde se provee una estimación del área de un círculo y se utiliza una fórmula que conduce a $\pi = 256/81$ y que aproxima el valor de π a 3.1605, con una cifra decimal correcta [3]. Desde entonces, matemáticos de todas las épocas han hecho un sin número de esfuerzos por encontrar la mayor cantidad de cifras decimales correctas para el número π .

Fue Arquímedes quién demostró en su trabajo "Sobre la Medida del Círculo" [4], la existencia única de una constante (π) que relaciona el área A de un círculo con su circunferencia C, expresado matemáticamente como:

$$A = \frac{C^2}{4\pi} \tag{1.1}$$

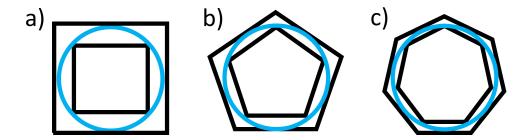


Figura 1.1: Método de exhuación aplicado a un círculo utilizando a) un cuadrado, b) un pentágono y c) un heptágono.

donde $C = 2\pi R$, siendo R el radio del círculo. Durante su estudio referente a la constante matemática, Arquímedes desarrollo el método de exhuasión. El método consiste en determinar el área o perímetro de una figura geométrica a partir de inscribir y circunscribir polígonos (con áreas y perímetros conocidos), en torno a la misma (Figura 1.1). El método de exhuación junto con la relación matemática 1.1 le permitió a Arquímides establecer un límite inferior y superior para el valor exacto de π , expresado por la desigualdad:

$$3 + \frac{10}{71} < \pi < 3 + \frac{1}{7} \tag{1.2}$$

Para este problema Arquímedes consideró polígonos de tipo $N=6\times 2^n$ donde N es el número de lados del polígono, para los valores n=0,1,2,3 y 4; esto es, polígonos con N=6,12,24,48 y 96 lados [5]. El trabajo desarrollado por Arquímedes tuvo un impacto sin precedentes en el estudio de las matemáticas. El método de exhuación evolucionó a tal punto de convertirse en lo que hoy se conoce como cálculo integral. A partir de la aportación de Arquímedes y hasta el siglo XVII, los matemáticos se dedicaron a mejorar la aproximación de π , donde se trabajó con polígonos con mayor número de lados. La problemática pasó a ser cuestión de qué matemático realizaba mayor cantidad de cálculos. Fue en el siglo XVII cuando el matemático inglés John Wallis aportó importantes herramientas para las matemáticas, tales como el desarrollo de métodos analíticos y de interpolación, estudios sobres series infinitas, además de una nueva terminología y notación matemática que permitieron un avance considerable de la misma. Entre sus contribuciones más notables se encuentran expresiones exactas para el número π .

1.2. John Wallis

Como se ha venido comentando, Arquímedes sentó las bases para obtener una expresión numérica aproximada para π , sin embargo la problemática estribaba en obtener una expresión exacta a partir de un cálculo infinitesimal, ya que no se contaban con las herramientas adecuadas. Por otro lado, el infinito como tal es un concepto matemático abstracto; sin embargo, coincidentemente el matemático inglés John Wallis fue asimismo uno de los primeros estudiar y trabajar con infinitos obteniendo resultados concretos [6]. John Wallis fue de los fundadores de la Royal Society en 1660, en su haber de contribuciones destacan correcciones a conceptos sobre mecánica que persistían desde los griegos, estudió el concepto y las propiedades de las secciones cónicas y fue quien introdujo el símbolo " ∞ " para representar el infinito en su obra magna Arithmetica Infinitorium donde también hace estudios del concepto de π [7]. En este documento, Wallis calculó el área de un cuarto de círculo de radio unitario con la intención de obtener una expresión para π , para ello Wallis evaluó lo que en notación moderna se representa mediante la integral $\int_0^1 x^p (1-x)^q dx$ donde p y q son enteros ó q=0 y p es racional. Sorprendentemente, en sus hallazgos Wallis logró encontrar una bella y simple expresión exacta para π (concretamente para $\frac{\pi}{2}$) escrita en términos de una razón infinita entre los cuadrados de números pares y números impares [8]. Hoy en día tal expresión se conoce como la fórmula o producto de Wallis y se representa de la siguiente forma:

$$\frac{\pi}{2} = \frac{2 \cdot 2}{1 \cdot 3} \frac{4 \cdot 4}{3 \cdot 5} \frac{6 \cdot 6}{5 \cdot 7} \dots \tag{1.3}$$

Desde la primera aparición de la fórmula de J. Wallis en 1655 1.3 se han reportado diferentes pruebas alternativas de dicha expresión en diversos campos de las matemáticas, como probabilidad, combinatoria, probabilidad, geometría, trigonometría y en cálculo de integrales trigonométricas. Sin embargo, no es hasta el año 2015 (exactamente 360 años después) que se dio la primera derivación de la fórmula a través de la solución de un problema físico, específicamente en un problema de mecánica cuántica de gran importancia -el átomo de hidrógeno -. Los autores de esta derivación, Tamar Friedmann y Carl Hagen, realizaron un cálculo variacional para determinar el espectro de energías del átomo de hidrógeno [9]. Al revisar el error en su estimación con respecto a la solución exacta del

átomo de hidrógeno descubren que en el límite clásico ($l \to \infty$, con l el número cuántico orbital) emerge del cálculo un producto infinito, producto que corresponde exactamente a la fórmula de J. Wallis para el número π .

1.3. El átomo de hidrógeno y la fórmula de Wallis

El trabajo original de T. Friedmann y C. Hagen al que nos referimos lleva como título, Quantum mechanical derivation of the Wallis formula for π , publicado en el Journal of Mathemathical Physics (2015) [9]. En el mismo, utilizaron el método variacional de Rayleigh-Ritz de teoría cuántica para obtener una aproximación del espectro de energías del átomo de hidrógeno, inclusive, considerando el problema en dimensiones arbitrarias.

Cabe mencionar que el átomo de hidrógeno es uno de los pocos problemas de Mecánica Cuántica que tiene una solución exacta conocida. Para determinar el error de su aproximación (exactitud de la solución variacional), Friedmann y Hagen, definieron la razón (cociente) entre la solución de su aproximación y la solución exacta del problema, de modo que la tendencia a la unidad de este cociente da una medida de la exactitud de la solución variacional. Como detallaremos más adelante, la comparación entre estas expresiones se escribe como,

$$\frac{\langle H \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}^{N}} = \frac{(l + \frac{N-1}{2})^{2}}{l + \frac{N}{2}} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})}{\Gamma(l + \frac{N}{2})} \right]^{2}$$
(1.4)

Donde $\langle H \rangle_{min}^l$ representa el valor de expectación del problema, $E_{0,l}^N$ la energía del estado basal de átomo de hidrógeno, Γ la función especial gamma, l el número cuántico angular orbital y N un parámetro "dimensional" que reduce el problema al átomo de hidrógeno a las tres coordenadas espaciales físicas cuando N=3. La discrepancia entre ambas soluciones, disminuye conforme se consideran estados de mayor energía, i.e., la ecuación 1.4 tiende a uno para valores grandes de l.

Es entonces que a partir del límite clásico en 1.4, que los autores reconocen de sus expresiones la aparición de la fórmula de Wallis, representada en la notación moderna a través de un productorio infinito,

$$\lim_{l \to \infty} \prod_{j=1}^{l+1} \frac{(2j)(2j)}{(2j-1)(2j+1)} = \frac{\pi}{2}$$
 (1.5)

De esta sorprendente conexión entre una fórmula para el número π y un problema canónico de Mecánica Cuántica, a través de la concisa y bella expresión de John Wallis, descubierta recientemente por Friedmann y Hagen en el átomo de hidrógeno, surge la interrogante natural de si existirán otros sistemas cuánticos que se relacionen similarmente con la fórmula de Wallis o a algo análogo. Dar respuesta a esta interrogante es precisamente el objetivo general de la presente tesis.

Capítulo 2

Hipótesis de la tesis y objetivos

Motivados por los hallazgos de Friedmann y Hagen donde reportan una derivación de la fórmula de Wallis a partir de un problema de física cuántica utilizando cálculo de variaciones, en la presente tesis se propone realizar un estudio sistemático de distintos problemas de campo central con soluciones exactas y aproximadas. Los problemas a considerar en particular, tienen aplicación en física de partículas y altas energías, aunque podrían asismismo aplicarse en problemas de estado sólido, tales como átomos hidrogenoides y el problema del espectro de excitones en semiconductores.

2.1. Hipótesis

La conexión entre el número π a través de la fórmula de Wallis subyascente en el espectro energético del átomo de Hidrógeno no tiene porqué ser única en la naturaleza y podrá presentarse en otros potenciales de campo central de la forma genérica $V(r) = \sum_{\mu=-2}^{2} a_{\mu} r^{\mu}$ que modelan los potenciales de Física de altas energías, el de intercambio de gluón, confinamiento quark-antiquark y potenciales tipo Pösch-Teller. Por otro lado, el espectro de energías de los potenciales mencionados obtenidos por la técnica variacional Rayleigh-Ritz, presentarán similitud con las soluciones obtenidas por el método de Nikiforov Uvarov, por lo que tales soluciones en el límite clásico del problema $(l \to \infty)$, deberán conducirá asismismo expresiones tipo Wallis para π .

2.2. Objetivos

2.2.1. Objetivo general

Determinar el espectro de energía del estado basal para distintos problemas de campo central dentro del esquema de cálculo de variaciones e indagar sobre su posible correlación con expresiones compactas para el número de π tipo Wallis. Para tal estudio se consideran potenciales de intercambio de gluón, confinamiento quark-antiquark y potenciales tipo Pösch-Teller.

2.2.2. Objetivos específicos

- Calcular el espectro de energías del estado base, a partir del método variacional para sistemas conformado por un par quark-antiquark.
- Reducir el problema al caso de átomo hidrogenoide y oscilador armónico, en caso de ser posible. Comparar la solución con la energía exacta y para el caso genérico utilizar los valores reportados por el método de Nikiforov Uvarov.
- Determinar el error de la aproximación obtenida, buscando la mísma tendencia irregular que Friedmann y Hagen encontraron para el átomo de hidrógeno.
- Calcular el espectro de energías del estado base para el potencial Pöschl-Teller.
- Indagar sobre diferentes propiedades de la función Gamma para obtener derivaciones alternativas de la fórmula de Wallis, o diferentes expresiones matemáticas para su representación.

En el siguiente capítulo se establece el marco teórico, donde se profundiza en cada uno de los conceptos necesarios para entender, qué son los problemas de campo central, los métodos mecánico cuánticos de aproximación empleados, *i.e.*, el método variacional y método de Nikiforv-Uvarov, los estudios relacionados con la derivación de Friedmann y Hagen, así como los potenciales utilizados para la obtención de resultados en el presente trabajo.

Capítulo 3

Marco Teórico

El marco teórico en que se encuentra sustentada esta tesis es el de la Teoría Cuántica. En esta teoría, para sistemas físicos no relativistas, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger dependiente o independiente del tiempo para describir el sistema [10]. La ecuación independiente del tiempo es utilizada para describir sistemas estacionarios, matemáticamente se expresa como una ecuación de valores propios:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \tag{3.1}$$

donde $\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V$, es un operador conocido como el hamiltoniano del sistema que, contiene la información de la energía cinética y potencial; \hbar es la constante de Dirac, m la masa del electrón, Ψ es la función de onda que describe el comportamiento del electrón y E la energía del sistema [11]. El problema principal en sistemas estacionarios consiste en resolver la ecuación 3.1.

Cuando se considera un sistema bajo la presencia de un campo eléctrico, cuya magnitud depende únicamente de la distancia respecto a un punto en el espacio r, i.e. V = V(r), surge un problema conocido como problema de campo central [12].

3.1. Problemas de Campo central

Las leyes físicas y sus resultados son independientes del sistema de referencia utilizado, por ello, al abordar un problema se utilizan marcos de referencia convenientes. Los problemas de campo central son aquellos donde se considera un campo eléctrico cuya magnitud depende únicamente de la distancia respecto a un punto en el espacio. Son sistemas invariantes rotacionalmente y en consecuencia poseen una simetría esférica espacial. Son de especial interés por su apliación en la descripción de semiconductores [13], estados hidrogenoides en semiconductores, como impurezas aceptoras y donodoras, así como excitones [12], partículas elementales y altas energías[14], entre otros.

Para estos casos resulta conveniente establecer un sistema de coordenadas esféricas, y luego se procede a utilizar el método de separación de variables. Así, se supone que la función de onda Ψ de la ecuación 3.1 es igual al producto de dos funciones R(r) y $Y(\theta, \phi)$, una función radial y una función angular, respectivamente. En problemas de campo central, la ecuación de Schrödinger es

$$\hat{\mathcal{H}}R(r)Y(\theta,\phi) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)R(r)Y(\theta,\phi) = ER(r)Y(\theta,\phi)$$
(3.2)

donde ∇^2 depende de r, θ y ϕ . De la ecuación 3.2 se obtiene una ecuación dependiente de la función angular $Y(\theta, \phi)$ dada por,

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} Y(\theta, \phi) + \frac{1}{tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \phi) + \frac{1}{sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) = -l(l+1)Y(\theta, \phi)$$
(3.3)

donde l(l+1) es una constante de igualdad que surge de utilizar la condición de independecia de variables y l sólo puede tomar los valores 0, 1, 2, 3, ... La constante l corresponde al valor del número cuántico orbital angular asociado al potencial radial.

A su vez de la misma expresión, ecuación 3.2, se obtiene una ecuación radial dependiente de la función R(r) descrita por:

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} R(r) + V(r) R(r) - ER(r) \right) = l(l+1)$$
 (3.4)

La ecuación 3.3 describe el comportamiento angular de cualquier problema de campo central, independientemente de la forma explicita del potencial, cuya solución se expresa en términos de los esféricos armónicos $Y_l^m(\theta,\phi)$. La ecuación 3.4 describe el comportamiento radial del sistema, cuya solución depende de la forma explicita del potencial V(r) [15]. Bajo la consideración de un potencial Coulombiano, $V(r) \propto 1/r$, la ecuación 3.4 se utiliza para modelar un sistema conformado por dos partículas, el átomo de hidrógeno [Apéndice A]. En este caso la solución del problema tiene la forma:

$$\Psi = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right) (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_{l,m}(\cos\theta) e^{im\phi}$$
(3.5)

Donde L_{n-l-1}^{2l+1} representa los polinomios asociados de Laguerre y P_{lm} los polinomios asociados de Legendre. En la misma expresión a_o es el radio de Bohr, n es el número cúantico principal que define la energía de los niveles principales y que puede tomar solo valores enteros positivos; l es el número cuántico angular que da información de la energía de los subniveles del sistema además de definir su geometría espacial, puede tomar valores desde 0 hasta n-1; m es el número cuántico magnético que define los orbitales y la orientación de los subniveles en presencia de un campo magnético.

Es importante mencionar que la mayoría de los problemas de campo central no tienen solución exacta, son poco frecuentes los sistemas que cuentan con solución analítica cerrada, el problema Coulombiano del átomo de Hidrógeno es uno de ellos. Para aquellos problemas sin solución conocida, se utilizan herramientas, que permiten obtener una aproximación a la solución de sus eigenvalores eigenfunciones. Al conjunto de estas herramientas y suposiciones ad hoc se les denomina métodos de aproximación.

3.2. Métodos de aproximación

Los métodos de aproximación se han desarrollado para aquellos problemas sin solución exacta, permitiendo aproximarse al comportamiento real del sistema. Históricamente se han desarrollado con la finalidad de resolver problemas físicos específicos o para resolver

problemas matemáticos. En todo caso diversos métodos de aproximación tienen aplicaciones en problemas de mecánica cuántica [16].

3.2.1. Método Variacional

El método variacional o de Rayleigh-Ritz, es un método de aproximación que establece un límite superior para las energías de un sistema, el cual es utilizado en problemas donde se conoce el hamiltoniano del sistema pero se desconocen las funciones de onda y las energías. La principal aplicación del método de Rayleigh-Ritz es determinar la energía del estado base; ya que para estados excitados el álgebra involucrada aumenta considerablemente de dificultad [17].

En forma resumida, el método variacional parte del esquema variacional,

$$\delta E(\Psi) = 0 \tag{3.6}$$

Donde $E(\Psi)$ es el valor de expectación de la energía en el estado $|\Psi\rangle$ dado por

$$E(\Psi) = \frac{\langle \Psi_{\alpha} | H | \Psi_{\alpha} \rangle}{\langle \Psi_{\alpha} | \Psi_{\alpha} \rangle} \tag{3.7}$$

donde H es el Hamiltoniano del sistema cuántico, Ψ , y en consecuencia $E(\Psi)$, dependen de un parámetro α , i.e. $\Psi \to \Psi_{\alpha}$ y $E \to E(\Psi_{\alpha})$. Bajo el esquema variacional de la ecuación 3.6, se varía el parámetro α para encontrar el valor mínimo de energía y así establecer una cota superior para su valor real. Este límite superior es consecuencia de la interpretación probabilística del valor de expectación de la energía, donde se cumple la desigualdad:

$$\frac{\langle \Psi_{\alpha} | H | \Psi_{\alpha} \rangle}{\langle \Psi_{\alpha} | \Psi_{\alpha} \rangle} \ge E_0 \tag{3.8}$$

donde la igualdad se cumple si y sólo si la función de onda Ψ_{α} , es proporcional a la función de onda del estado basal Ψ_0 .

El método consiste en proponer una función de onda Ψ , que cumpla de forma general con las características y propiedades físicas del sistema (número de nodos, simetría, comportamiento en el infinito, etc.), para todos aquellos detalles que no se conozcan con

precisión se introducen parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ Posteriormente, a partir de la ecuación 3.7 se calcula el valor de expectación utilizando al función prueba. Como resultado se obtiene una expresión para la energía en términos de los parámetros $\alpha_1, \alpha_2 \ldots$ de la forma:

$$E_0(\alpha_1, \alpha_2 \dots) = \frac{\langle \Psi_0(\alpha_1, \alpha_2 \dots) | H | \Psi_0(\alpha_1, \alpha_2 \dots) \rangle}{\langle \Psi_0(\alpha_1, \alpha_2 \dots) | \Psi_0(\alpha_1, \alpha_2 \dots) \rangle}$$
(3.9)

Posteriormente, se determinan los parámetros α_i que dan el mínimo de energía a partir la expresión:

$$\frac{\partial E_0(\alpha_1, \alpha_2 \dots)}{\partial \alpha_i} = 0 \tag{3.10}$$

Finalmente, se sustituyen los valores de α_i en la ecuación 3.9 para obtener la energía y la forma funcional de su eigenestado correspondiente $\Psi_0(\alpha_1, \alpha_2 \dots)$.

3.2.2. Método de Nikiforov-Uvarov

El método de Nikiforov-Uvarov [18] consiste en resolver una ecuación diferencial de segundo orden de la forma

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi' + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi = 0$$
(3.11)

donde $\sigma(s)$ y $\tilde{\sigma}(s)$ son polinomios de máximo segundo orden, $\tilde{\tau}(s)$ un polinomio de máximo primer orden, $\psi(s)$ una función de tipo hipergeométrica, $\psi'(s)$ la primera derivada y $\psi''(s)$ la segunda derivada de $\psi(s)$, respectivamente. El método consiste en reescribir la función ψ como el producto de dos funciones: $\phi(s)$ y y(s). Este cambio de variables permite obtener una ecuación diferencial similar a 3.11 pero en términos de la función y(s). Los coeficientes variables de la ecuación resultante son diferentes a los de la ecuación 3.11 pero las características de estos (el orden de los polinomios) son las mismas. Durante el proceso algebraico de esta transformación, se establecen una serie de condiciones que en combinación con el orden de los polinomios $\sigma(s)$, $\tilde{\sigma}(s)$ y $\tilde{\tau}(s)$ permite solucionar la misma.

La ecuación radial de Schrödinger para problemas de campo central, puede escribirse en términos de la ecuación 3.11 para ciertos potenciales [18]. Si una ecuación cumple con las condiciones de la ecuación de Nikiforov Uvarov, es posible conocer de forma explícita la función hipergeométrica ψ . Un caso puntual es el átomo de hidrógeno, cuya ecuación radial cumple con las condiciones de la ecuación 3.11 y al aplicar el método de Nikiforov-Uvarov, se obtiene la expresión exacta para la energía y la función de onda de este problema [Apéndice B].

Tanto el método de Rayleigh-Ritz como el de Nikiforov-Uvarov conducen a las soluciones exactas del problema del átomo de hidrógeno. Sin embargo, bajo el esquema variacional sólo se obtiene la energía exacta del estado basal, mientras que en el método Nikiforov-Uvarov arroja el resultado general del problema; es decir, el estado base y todas las energías de los estados excitados y sus correspondientes eigenfunciones. Cabe mencionar que en términos prácticos, la prioridad es conocer la energía basal y en algunos casos los primeros estados excitados del sistema. La elección de un método u otro dependerá principalmente del problema. En este trabajo de tesis nos concentramos en el cálculo del espectro de energías de diferentes problemas de campo central, utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz con diferentes funciones prueba. Además utilizamos el método de Nikiforov-Uvarov como punto de comparación para el espectro de energías obtenido por un método de aproximación diferente. Por completes y para construir la base inspiracional del desarrollo de esta tesis, en los siguientes capítulos se describe a detalle el trabajo de Friedmann y Hagen, derivaciones alternativas de la fórmula de Wallis, la física involucrada en los potenciales a utilizar y su solución mediante el método de Nikiforov-Uvarov.

Capítulo 4

Derivación de Friedmann y Hagen de la fórmula de Wallis para π

4.1. Metodología de Friedmann y Hagen

La estrategia medular de la presente tesis está inspirada en el trabajo de Friedmann y Hagen[9]. Por lo tanto es de crucial importancia describir los detalles de su razonamiento y metodología. Su punto de partida es utilizar la técnica variacional para resolver el problema de campo central con un potencial Coulombiano - el del átomo de Hidrógeno - donde la parte radial de la ecuación de Schroödinger se escribe como

$$H_{AH}(r)R_{\alpha l}(r) = \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - \frac{e^2}{r}\right]R_{\alpha l}(r) = ER_{\alpha l}(r), \quad (4.1)$$

con $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ representando la masa reducida del sistema electrostático electrón-protón, siendo m_e y m_p , las masas del electrón y protón en reposo, respectivamente. Haciendo U(r) = rR(r), la ecuación 4.1 se reescribe de la forma,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r}\right)U(r) = EU(r)$$
 (4.2)

La ecuación 4.2 se conoce como ecuación radial reducida y a partir de su comportamiento asintótico para valores pequeños de r, se reescribe como,

$$-\frac{d^2U(r)}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2}U(r) = 0$$
 (4.3)

cuya función U(r) se aproxima a

$$U(r) \sim r^{l+1} \tag{4.4}$$

En el caso asintótico para valores grandes de r, la ecuación radial reducida se comporta como

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}U(r) = 0, (4.5)$$

donde la función U(r) se aproxima a

$$U(r) \sim e^{\frac{\sqrt{2\mu(-E)}}{\hbar}r},\tag{4.6}$$

con E<0 para estados ligados. Bajo estas consideraciones, Friedmann y Hagen utilizan la función prueba dada por,

$$R_{\alpha l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2} \tag{4.7}$$

siendo α el parámetro variacional. El cálculo variacional implica obtener el valor esperado $E(\Psi) = \frac{\langle \Psi_{\alpha} | H | \Psi_{\alpha} \rangle}{\langle \Psi_{\alpha} | \Psi_{\alpha} \rangle}$, descrito en la ecuación 3.7, donde Ψ está dado por el producto de la ecuación 4.7 y los esféricos armónicos $Y_l^m(\theta, \phi)$, i.e. $\psi_{\alpha l m} = r^l e^{-\alpha r^2} Y_l^m(\theta, \phi)$, para ello resulta conveniente utilizar la definición de la función especial $\Gamma(x)$, dada por

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty r^{x-1} e^{-r} dr \tag{4.8}$$

De la relación anterior y el valor de expectación dado por la ecuación 3.7, Friedmann y Hagen reportan¹ la siguiente expresión para la energía basal en términos de α ,

The contraction of the second of the contraction o

$$\langle H_{FH} \rangle_{\alpha,l} \equiv \frac{\langle \psi_{\alpha lm} | H_{FH}(r) | \psi_{\alpha lm} \rangle}{\langle \psi_{\alpha lm} | \psi_{\alpha lm} \rangle} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(l + \frac{3}{2} \right) (2\alpha) - e^2 \sqrt{2\alpha} \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})}. \tag{4.9}$$

La minimización de esta energía fija el valor del parámetro α al valor,

$$\alpha = 2 \left[\frac{2\mu e^2}{(2l+3)\hbar^2} \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+3/2)} \right]^2$$
 (4.10)

que al sustituirla en 4.9 conduce al resultado variacional,

$$\langle H_{FH} \rangle_{min}^{l} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^2$$
 (4.11)

que representa el límite superior para la energía más baja para un l dado.

Por otro lado, la energía exacta del átomo de hidrógeno para su estado basal es (ver Apéndice A):

$$E_{0,l} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \frac{1}{(l+1)^2} \tag{4.12}$$

Friedmann y Hagen calculan el cociente de su expresión variacional 4.11 con la de la energía exacta del átomo de hidrógeno en su estado basal 4.12, lo que por ende define el nivel de precisión o exactitud de su solución variacional. Tal razón está dada por

$$\frac{\langle H_{FH} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \frac{(l+1)^{2}}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^{2}, \tag{4.13}$$

cociente que, contrario a lo esperado, se aproxima a la unidad a medida que aumenta el valor de l. Como ilustración, en el gráfico 4.1, se grafica la razón de la ecuación 4.13 en función del número cuántico l. Para los primeros 100 valores de l, se muestra una clara tendencia hacia la unidad conforme l aumenta. Por la importancia del cociente en 4.13 en el presente trabajo de tesis, se utiliza el símbolo \mathcal{W} para referirse al mismo en lo susbsecuente en forma abreviada i.e.,

$$\mathcal{W}_l \equiv \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^2 = \frac{\langle H_{FH} \rangle_{min}^l}{E_{0,l}}$$
(4.14)

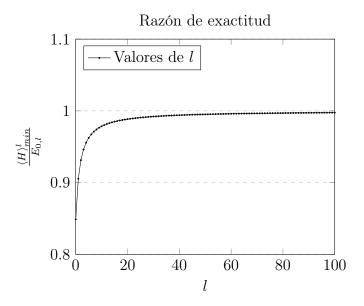


Figura 4.1: Cociente entre el valor de expectación obtenido mediante el método variacional y la solución analítica cerrada del átomo de hidrógeno. El cociente tiende a la unidad conforme l (número cuántico angular) aumenta de valor.

Matemáticamente, para el caso cuando $l \to \infty$, el cociente W_l tiende a la unidad [Apéndice C], esto es,

$$\lim_{l \to \infty} W_l = \lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{FH} \rangle_{min}^l}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^2 = 1$$
 (4.15)

Por otro lado, se puede manipular algebraicamente límite lím $_{l\to\infty} \mathcal{W}_l$ utilizando las propiedades de la función Gamma, $\Gamma(x+1)=x!$ y $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$ de la siguiente forma

$$\lim_{l \to \infty} \mathcal{W}_l = \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^2 = 1 \tag{4.16}$$

$$\lim_{l \to \infty} \frac{2}{2l+3} \left[\frac{(l+1)(l)(l-1)...3 \cdot 2 \cdot 1}{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{2l-1}{2} \cdot \frac{2l-3}{2}...\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}} \right]^{2} = 1$$
 (4.17)

$$\frac{2}{\pi} \lim_{l \to \infty} \frac{1}{2l+3} \left[\frac{(2l+2)(2l)(2l-2)...6 \cdot 4 \cdot 2}{(2l+1) \cdot (2l-1) \cdot (2l-3)...3 \cdot 1} \right]^2 = 1$$
 (4.18)

$$\lim_{l \to \infty} \frac{1}{2l+3} \left[\frac{(2l+2)(2l)(2l-2)...6 \cdot 4 \cdot 2}{(2l+1) \cdot (2l-1) \cdot (2l-3)...3 \cdot 1} \right]^2 = \frac{\pi}{2}$$
(4.19)

$$\lim_{l \to \infty} \prod_{j=1}^{l+1} \frac{(2j)(2j)}{(2j-1)(2j+1)} = \frac{\pi}{2}$$
 (4.20)

que conduce a la famosa fórmula de John Wallis en su notación moderna en forma de productoria. Esto constituye el resultado principal reportado por Friedmann y Hagen.

Átomo de Hidrógeno en dimensiones arbitrarias

En el mismo trabajo, los autores reportan un cálculo variacional para el problema hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones arbitrarias. En este problema, se reescribe la ecuación de Schrödinger utilizando una generalización del sistema de coordenadas polares, la teoría del operador de momento angular en "N-dimensiones" y el potencial que cumple con la Ley de Gauss en este sistema coordenado generalizado, descritos en [19], [20] y [21] respectivamente². Bajo estas consideraciones podemos introducir una "ecuación

$$x_{1} = r \cos \theta_{1} \sin \theta_{2} \dots \sin \theta_{D-1}$$

$$x_{2} = r \sin \theta_{1} \sin \theta_{2} \dots \sin \theta_{D-1}$$

$$\vdots$$

$$x_{j} = r \cos \theta_{j-1} \sin \theta_{j} \dots \sin \theta_{N-1}, \qquad 3 \leq j \leq N-1$$

$$\vdots$$

$$x_{N-1} = r \cos \theta_{N-2} \sin \theta_{N-1}$$

$$x_{N} = r \cos \theta_{N-1}$$

$$(4.21)$$

Estos componentes tienen la propiedad $\sum_{j=1}^{N} x_j^2 = r^2$, mientras que el laplaciano N-dimensional se define acordemente como

$$\nabla_N^2 = \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}.$$
 (4.22)

Note que el diferencial del volumen de un elemento en esta configuración espacial N-dimensional estará dado por

$$\prod_{j=1}^{N} dx_j = r^{N-1} dr d\Omega, \qquad \text{con} \qquad d\Omega = \prod_{j=1}^{N-1} (\sin \theta_j)_{j-1} d\theta_j.$$
 (4.23)

 $^{^2}$ los vectores en este espacio N-dimensional cuentan con un número N de componentes definidos de la forma,

de Schrödinger N-dimensional de la forma,

$$H_N(r)R_{\alpha l}(r) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N-1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r} - E \right\} R_{\alpha l}(r) = 0 \quad (4.24)$$

donde hemos definido como H_N al hamiltoniano del problema hipotético del átomo de hidrógeno N-dimensional. Note que bajo esta terminología, en los casos cuando N=2 y N=3, la parte de energía cinética de 4.24 se reducen a la parte radial del laplaciano en coordenadas polares y esféricas, respectivamente. Siguiendo un procedimiento similar que para el caso N=3 no es díficil llegar a la expresión para el caso más general N-dimensional de la minimización de la energía conduciendo a

$$\langle H_N \rangle_{min}^l = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})}{\Gamma(l + \frac{N}{2})} \right]^2 \frac{1}{l + \frac{N}{2}}$$

$$(4.25)$$

que evidentemente se reduce a 4.11 cuando N=3. Por otro lado la energía exacta basal del átomo de hidrógeno para este problema hipotético N-dimensional es

$$E_{0,l}^{N} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \frac{1}{(l + \frac{N-1}{2})^2}.$$
 (4.26)

por lo que el cociente entre $\langle H_N \rangle_{min}^l$ y $E_{0,l}^N$ conduce a,

$$\frac{\langle H_N \rangle_{min}^l}{E_{0,l}^N} = \left[\frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})}{\Gamma(l + \frac{N}{2})} \right]^2 \frac{(l + \frac{N-1}{2})^2}{l + \frac{N}{2}}$$
(4.27)

Esta expresión tiende a la unidad cuando $l \to \infty$, de forma que:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_N \rangle_{min}^l}{E_{0,l}^N} = \lim_{l \to \infty} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})}{\Gamma(l + \frac{N}{2})} \right]^2 \frac{(l + \frac{N-1}{2})^2}{l + \frac{N}{2}} = 1.$$
 (4.28)

Caso Impar: Friedmann y Hagen utilizan el término "dimensión impar" para el caso donde N = 2k + 1 siendo k un entero positivo. ara este caso, sustityendo N = 2k + 1 en 4.28 tenemos,

 $^{^3}$ Sin embargo es importante mencionar que desde el punto de vista Físico, el caso para N=2 el potencial de Coulomb de la ecuación 4.24 no satisface la Ley de Gauss. El potencial correcto que sí satisface Gauss en este caso (N=2) tiene forma logarítmica [22].

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{2k+1} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}^{N}} = \lim_{l \to \infty} \frac{(l+k)^{2}}{(l+k+\frac{1}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+k)}{\Gamma(l+k+\frac{1}{2})} \right]^{2} = 1$$
 (4.29)

La expresión anterior es equivalente a $\lim_{l\to\infty} \mathcal{W}_l$ bajo la transformación $l+k\to l'+1$, por lo cual, para N impares se tiene el límite $\lim_{l\to\infty} \frac{\langle H_{2k+1}\rangle_{min}^{l+k}}{E_{0,l}^N} = \lim_{l\to\infty} \mathcal{W}_l$ a partir del cual obtiene se tiene de nuevo el producto de Wallis (ver 4.15 - 4.19).

Caso Par: Similar al caso anterior, los autores utilizan el término "dimensión par" para el caso donde N=2k siendo k un número entero. Donde de la expresión 4.28 se tiene ahora,

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{2k} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}^{2k}} = \lim_{l \to \infty} \left[\frac{\Gamma(l+k-\frac{1}{2})}{\Gamma(l+k)} \right]^{2} \frac{(l+k-\frac{1}{2})^{2}}{l+k} = 1$$
 (4.30)

Haciendo la sustitución de la forma $l+k=l^*+1$ en la ecuación 4.30, conduce a la expresión⁴

$$\lim_{l^* \to \infty} \frac{\langle H_{2k} \rangle_{min}^{l^*}}{E_{0,l^*}^{2k}} = \lim_{l^* \to \infty} \left[\frac{\Gamma(l^* + \frac{1}{2})}{\Gamma(l^* + 1)} \right]^2 \frac{(l^* + \frac{1}{2})^2}{l^* + 1} = 1$$
(4.31)

$$= \lim_{l^* \to \infty} \left[\frac{\frac{2l^* - 1}{2} \cdot \frac{2l^* - 3}{2} \cdot \frac{2l^* - 5}{2} \dots \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}}{l^* \cdot (l^* - 1) \cdot (l^* - 2) \dots 3 \cdot 2 \cdot 1} \right]^2 \frac{(2l^* + 1)^2}{4(l^* + 1)}$$
(4.32)

$$= \lim_{l^* \to \infty} \left[\frac{(2l^* - 1) \cdot (2l^* - 3) \cdot (2l^* - 5) \dots 3 \cdot 1 \cdot \sqrt{\pi}}{2l^* \cdot (2l^* - 2) \cdot (2l^* - 4) \dots 6 \cdot 4 \cdot 2} \right]^2 \frac{(2l^* + 1)^2}{2(2l^* + 2)}$$
(4.33)

$$= \lim_{l^* \to \infty} \left[\frac{(2l^* - 1) \cdot (2l^* - 3) \cdot (2l^* - 5) \dots 3 \cdot 1}{2l^* \cdot (2l^* - 2) \cdot (2l^* - 4) \dots 6 \cdot 4 \cdot 2} \right]^2 \frac{(2l^* + 1)^2}{2l^* + 2} \frac{\pi}{2} = 1$$
 (4.34)

$$\lim_{l \to \infty} \prod_{j=1}^{l+1} \frac{(2j-1)(2j+1)}{(2j)(2j)} = \frac{2}{\pi}$$
 (4.35)

⁴Esto es equivalente a hacer el cambio $l \to l + k - 1$.

CAPÍTULO 4. DERIVACIÓN DE FRIEDMANN Y HAGEN DE LA FÓRMULA DE WALLIS PARA π 21

Donde el resultado es el recíproco de la fórmula de Wallis. Es importante observar que el límite anterior, $\lim_{l^* \to \infty} \frac{\langle H_{2k} \rangle_{min}^{l^*}}{E_{0,l^*}^{2k}}$, es equivalente a $\lim_{l^* \to \infty} \mathcal{W}_l^{-1}$:

$$\lim_{l^* \to \infty} \frac{\langle H_{2k} \rangle_{min}^{l^*}}{E_{0,l^*}^{2k}} = \lim_{l^* \to \infty} \left[\frac{\Gamma(l^* + \frac{1}{2})}{\Gamma(l^* + 1)} \right]^2 \frac{(l^* + \frac{1}{2})^2}{l^* + 1} = 1$$
(4.36)

Sustituyendo $l^* = l + 1$ en 4.32,

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{2k} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}^{2k}} = \lim_{l \to \infty} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(l + 2)} \right]^{2} \frac{(l + \frac{3}{2})^{2}}{l + 1}$$
(4.37)

$$= \lim_{l \to \infty} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(l+1)} \right]^2 \frac{l + \frac{3}{2}}{(l+1)^2} \frac{l + \frac{3}{2}}{l+1}$$
 (4.38)

$$= \lim_{l^* \to \infty} \frac{1}{\mathcal{W}_l} \frac{l + \frac{3}{2}}{l + 1} \tag{4.39}$$

$$= \lim_{l^* \to \infty} \frac{1}{\mathcal{W}_l} = \frac{2}{\pi}.$$
 (4.40)

En el siguiente capítulo se estudia derivaciones alternativas de la fórmula de Wallis.

Capítulo 5

Derivaciones alternativas de la fórmula de Wallis

En el presente capítulo, se dan a conocer dos trabajos relacionados al artículo de Friedmann y Hagen. El trabajo de Chaschina y Silagadze[23], quienes varian la función prueba en la metodología de Friedmann y Hagen, obteniendo así una segunda derivación para la fórmula de Wallis a partir del átomo de hidrógeno. El segundo trabajo corresponde a Cortese y García[24], ellos parten del problema hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones arbitrarias y utilizan su conexión con otros problemas de campo central para dar con una tercera derivación de la fórmula para π .

5.1. Átomo de Hidrógeno: función prueba lorentziana

Chaschina y Silagadze aplican la metodología de Friedmann y Hagen para el átomo de hodrógeno pero utilizando una función prueba tipo lorentziana en su cálculo variacional[23]. A continuación se describe brevemente los resultados de su trabajo. Empiezan con una función de onda prueba del tipo

$$\Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}} Y_l^m(\theta,\phi), \qquad (5.1)$$

donde l es el número cuántico angular, α el parámetro a variar y $Y_l^m(\theta,\phi)$ los esféricos

CAPÍTULO 5. DERIVACIONES ALTERNATIVAS DE LA FÓRMULA DE WALLIS23

armónicos. Como resultado de su cálculo variacional al problema del átomo de hidrógeno, los autores reportan un valor esperado de la forma,

$$\frac{\langle \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)|H_{AH}|\Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)\rangle}{\langle \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)|\Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)\rangle} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(l+1\right) \left(l+\frac{1}{2}\right) \frac{1}{\alpha^2} - \frac{e^2}{\alpha} \frac{1}{(l+\frac{1}{2})} \left\lceil \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{1}{2})} \right\rceil^2 \quad (5.2)$$

Donde H_{AH} es el hamiltoniano del átomo de hidrógeno. El mínimo de energía respecto al parámetro α que reportan está dado por

$$\langle H_{CS} \rangle_{min}^{l} = -\frac{\mu e^{4}}{2\hbar^{2}} \frac{1}{(l+1)(l+\frac{1}{2})^{3}} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{1}{2})} \right]^{4}$$

$$= -\frac{\mu e^{4}}{2\hbar^{2}} \frac{l+\frac{1}{2}}{l+1} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^{4}$$
(5.3)

donde hemos hecho $\langle H_{AH} \rangle_{min}^l \to \langle H_{CS} \rangle_{min}^l$ para denotar el uso de la función prueba lorentziana en el problema del átomo de hidrógeno. Chaschina y Silagadze, similarmente como lo hacen Freidmann y Hagen, describen una razón entre su solución $\langle H_{CS} \rangle_{min}^l$ (ecuación 5.3) y la energía exacta del estado basal del átomo de hidrógeno $E_{0,l} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \frac{1}{(l+1)^2}$. Este cociente tiende a la unidad cuando $l \to \infty$, de forma que:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{CS} \rangle_{min}^l}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{l + \frac{1}{2}}{(l+1)^3} \left[\frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^4 = 1$$
 (5.4)

Finalmente reportan que la expresión anterior y el resultado de Friedmann y Hagen son equivalentes ya que la ecuación 5.4 es proporcional al cociente W_l , y la término de proporcionalidad también tiende a la unidad a medida que $l\infty$, veamos

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{CS} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{l + \frac{1}{2}}{(l+1)^{3}} \left[\frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^{4}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{(l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2})^{2}}{(l+1)^{3}} \left[\frac{(l+1)^{2}}{l + \frac{3}{2}} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^{2} \right]^{2}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{(l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2})^{2}}{(l+1)^{3}} \mathcal{W}_{l}^{2}$$
(5.5)

Donde $W_l \equiv \frac{\langle H_{FH} \rangle_{min}^l}{E_{0,l}} \equiv \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^2$, el cociente entre el espectro de energía determinado por Friedmann y Hangen, y la solución exacta del estado basal del átomo de hidrógeno. Es importante mencionar que en el límite cuando $l \to \infty$, el cociente W_l conduce a la fórmula de Wallis (ver 4.15 - 4.19). Por ello, una diferente función prueba de la forma $R_{\alpha l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$, en un cálculo variacional para determinar el espectro de energías del átomo de hidrógeno también conduce a una derivación de la fórmula de Wallis. En el procedimiento reaparece el cociente W_l y en el límite clásico $l \to \infty$ de este cociente, se deriva la fórmula pre-newtoniana para π .

Adicionalmente, Chaschina y Silagadze reportan otro cálculo variacional para el problema del oscilador armónico, utilizando las funciones de onda Guassiana y Lorentziana, $R_{\alpha l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2}$ y $R_{\alpha l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$, respectivamente. Para el caso de la función Gaussiana, los valores exactos del oscilador armónico son reproducidos $E_{o,l} = \hbar\omega \left(l + \frac{3}{2}\right)$. Para el caso de la función Lorentziana se obtiene la expresión $E_l = \hbar\omega\sqrt{\frac{(l+1)(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})}{l-\frac{1}{2}}}$ cuyo cociente con la energía exacta del oscilador armónico tiende a uno, sin embargo, no se encuentra algún resultado equivalente al cociente \mathcal{W}_l y no existe alguna derivación para la fórmula de Wallis a partir de esta expresión.

El trabajo de Chaschina y Silagadze demuestra que funciones prueba distintas en un cálculo variacional, para el átomo de hidrógeno, conducen a una derivación de la fórmula de Wallis. En ambos casos, el cociente entre el resultado variacional y la energía exacta

del átomo de hidrógeno aparece el cociente W_l , a partir del cuál se deriva la fórmula para π de Wallis.

En el siguiente apartado, se comenta el trabajo de Ignasio Cortese y Antonio García, que involucra el problema hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones arbitrarias. En este caso aplican cálculo de variaciones tanto el problema de campo central, como la función prueba.

5.2. Dualidad de la ecuación de Schrödinger

Ignacio Cortese y Antonio García utilizan la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas generalizadas, donde surge el parámetro N denominado "dimensionalidad" del problema. La idea del trabajo consiste en utilizar una transformación para obtener una segunda ecuación de Schrödinger dependiente de una primera ecuación de Schrödinger. Para ello introducen una serie de variables que representan magnitudes físicas. Los valores que pueden adquirir estas variables dependen de las magnitudes físicas de la primera ecuación de Schrödinger. En consecuencia, si se conoce la solución a la primera ecuación de Schrödinger, es posible determinar la solución de la segunda ecuación de Schrödinger. Esta relación entre las magnitudes físicas de dos ecuaciones de Schrödinger, se denomina dualidad de la ecuación de Schrödinger [25]. Parten de la ecuación tipo Schrödinger,

$$H_{AHN}(r)R_{\alpha l}(r) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) + V(r) - E \right\} R(r) = 0 \quad (5.6)$$

donde H_{AHN} es el hamiltoniano del problema hipotético del átomo de hidrógeno y N el parámetro de dimensionalidad del problema i.e., cuando N=2 ó N=3 se obtiene el laplaciano en coordenadas polares o esféricas, respectivamente. Para esta ecuación, el potencial tiene la forma $V(r)=Kr^{\beta}$, donde K y β son constantes del problema. Bajo el cambio de variable:

$$r = \rho^{\frac{2}{\beta + 2}} \tag{5.7}$$

donde β es un número entero diferente de -2. Reescribiendo la ecuación tipo Schrödinger $H_{AHN}(r)$ y la función radial $R_{\alpha l}$ en términos de ρ ,

$$H_{AHN}(\rho)\tilde{R}(\rho) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d}{d\rho^2} + \frac{\beta + 2(N-1)}{(\beta+2)} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+N-2)}{\rho^2} \left(\frac{2}{\beta+2} \right)^2 \right) - \left(\frac{2}{\beta+2} \right)^2 \rho^{-\frac{2\beta}{\beta+2}} E + \left(\frac{2}{\beta+2} \right)^2 K \right\} \tilde{R}(\rho)$$
(5.8)

onde $\tilde{R}(\rho) \equiv R(r(\rho))$ y $H_{AHN}(\rho)$ es el hamiltoniano en términos de ρ . Posteriormente, se introducen nuevas magnitudes físicas efectivas $\varepsilon, \tilde{V}, D, L$, que se relacionan con las magnitudes físicas originales E, K, N, l de $H_{AHN}(\rho)$, de la forma:

Dimensionalidad Energía Momento Angular Potencial
$$D=\frac{2(\beta+N)}{\beta+2} \qquad \varepsilon=-(\frac{2}{\beta+2})^2K \qquad L=\frac{2}{\beta+2}l \qquad \tilde{V}=-E(\frac{2}{\beta+2})^2\rho^{-\frac{2\beta}{\beta+2}}$$

Por ello, la ecuación 5.8 se reescribe de la siguiente manera

$$H_{AHD}(\rho)R_{\alpha l}(\rho) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{(D-1)}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{L(L+D-2)}{\rho^2} \right) + \tilde{V}(\rho) - \varepsilon \right\} \tilde{R}(\rho) = 0 \quad (5.9)$$

Consecuencia del mapeo $H_{AHN}(r)R_{\alpha l}(r)$ (ecuación 5.6) a $H_{AHD}(\rho)R_{\alpha l}(\rho)$ (ecuación 5.9), a partir de la energía del problema inicial es posible conocer la energía renormalizada del segundo (ε). A continuación se utiliza esta dualidad para relacionar el átomo de hidrógeno 3D con el oscilador armónico 4-dimensional.

Dualidad entre el átomo de hidrógeno en \mathbb{R}^3 y el oscilador armónico en \mathbb{R}^4

Un caso llamativo que se presenta entre la transformación $H_{AHN}(r)R_{\alpha l}(r) \to H_{AHD}(\rho)R_{\alpha l}(\rho)$ es considerando el caso del potencial Coulombiano en coordenadas esféricas *i.e.*, el átomo de hidrógeno en la primera ecuación de Schrödinger, $H_{AHN}(r)R_{\alpha l}(r)$. Como se detalla a continuación, partiendo de este problema se obtiene el caso del oscilador armónico donde

el parámetro D=4 en 5.9, problema denominado: oscilador armónico en 4 dimensiones. Cornish [26] ha descrito el significado físico de este problema, dos osciladores armónicos bidimensionales cuyos momentos angulares siempre son iguales pero con sentidos opuestos.

Para el caso del átomo de hidrógeno en coordenadas esféricas, se tiene que los valores en $H_{AHN}(r)R_{\alpha l}(r)$ (ecuación 5.6) son N=3, $K=-e^2$, $\beta=-1$ y $V(r)=-e^2/r$. Bajo la consideración del cambio de variables descrito, se tiene:

$$r = \rho^2;$$
 $D = 4;$ $L = 2l;$ $\tilde{V} = -4E\rho^2;$ $\varepsilon = -4K$ (5.10)

Cortese y García utilizan la misma función prueba de Friedmann y Hagen, $R_{\alpha l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2}$. Por el cambio de variables anterior, la función prueba se rescribe como

$$\tilde{R}(\rho) = e^{-\alpha r^4} \rho^L \tag{5.11}$$

Por los valores de N, K, β y V(r) la ecuación tipo Schrödinger $H_{AHD}(\rho)R_{\alpha l}(\rho)$ (ecuación 5.9) se reescribe como:

$$H_{OA4}(\rho)R_{\alpha l}(\rho) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d}{d\rho^2} + \frac{3}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{L(L+2)}{\rho^2} \right) + K\rho^2 - \varepsilon \right\} R(\rho) = 0$$
 (5.12)

donde H_{OA4} es el hamiltoniano del oscilador armónico cuando D=4 en H_{AHD} .

Sea $E_{0,l} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \frac{1}{(l+1)^2}$ la energía basal del átomo de hidrógeno (ecuación 4.12), se establece la relación $K = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{\mu}} E_{0,l}(N+l+1)$. A partir de esta relación para K y la expresión para la energía (ε) de la ecuación 5.10, se toma en cuenta que oscilador armónico tiene una frecuencia de $\omega = \sqrt{\frac{-8E_{o,l}}{\mu}}$ para este caso. A partir de un cálculo variacional con la función prueba $\tilde{R}(\rho) = e^{-\alpha r^4} \rho^L$ en $H_{OA4}(\rho) R_{\alpha l}(\rho)$, Cortese y García reportan el valor de expectación

$$\langle H_{OA4} \rangle_{\alpha}^{L} = \frac{\Gamma(\frac{L+3}{2}) \left[2\alpha \hbar^{2} (L+3) + K\mu \right]}{\sqrt{2\alpha} \mu \Gamma(\frac{L}{2} + 1)}$$

$$(5.13)$$

De donde se deduce que el valor mínimo respecto al parámetro α está dado por,

$$\langle H_{OA4} \rangle_{min}^{L} = 2\hbar \omega \frac{\Gamma(\frac{L+3}{2})}{\Gamma(\frac{L}{2}+1)} \sqrt{\frac{L+3}{2}}$$
(5.14)

Para este caso, H_{OA4} , la energía exacta del estado basal del oscilador armónico está dado por la expresión [26]

$$E_{0,L,4} = \hbar\omega(L+2) \tag{5.15}$$

Se define un cociente entre el valor de expectación $\langle H_{OA4}\rangle_{min}^L$ y la energía exacta $E_{0,L,4}$ en 5.15, que permite conocer la similitud entre ambas expresiones, de forma que:

$$\frac{\langle H_{AH4} \rangle_{min}^{L}}{E_{0,L,4}} = 2 \frac{\sqrt{\frac{L+3}{2}}}{L+2} \left[\frac{\Gamma(\frac{L+3}{2})}{\Gamma(\frac{L}{2}+1)} \right]$$
 (5.16)

Bajo el cambio de variable L=2l y a partir del límite $l\to\infty$ la razón anterior se reescribe como,

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{OA4} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l,4}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\sqrt{l + \frac{3}{2}}}{l + 1} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(l + 1)} \right] = 1$$
 (5.17)

La ecuación 5.17 es el resultado principal de Cortese y Garcia, mismo que conduce al recíproco de la raíz cuadrada de la fórmula de Wallis, si se utilizan las propiedades de la función Gamma o notando su relación con W_l

$$\lim_{l \to \infty} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{W}_l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{OA4} \rangle_{min}^l}{E_{0,l,4}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\sqrt{l + \frac{3}{2}}}{l + 1} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(l + 1)} \right] = 1$$
 (5.18)

Adicionalmente los autores reportan el mismo mapeo y cálculo variacional para el casi hipotético del átomo de hidrógeno N-dimensional al oscilador armónico D-dimensional. Para este caso encuentran,

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{OA4} \rangle_{min}^{k,l}}{E_{0,l,4}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\sqrt{l+k+\frac{1}{2}}}{l+k} \left[\frac{\Gamma(l+k+\frac{1}{2})}{\Gamma(l+k)} \right] = 1$$
 (5.19)

Donde l y k están relacionadas con el momento angular L y la dimensionalidad D del

CAPÍTULO 5. DERIVACIONES ALTERNATIVAS DE LA FÓRMULA DE WALLIS29

oscilador armónico. Bajo el cambio de variable $l+k=l^{'}+1$, la expresión anterior conduce al límite

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{OA4} \rangle_{min}^{k,l}}{E_{0,l,4}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\sqrt{l+k+\frac{1}{2}}}{l+k} \left[\frac{\Gamma(l+k+\frac{1}{2})}{\Gamma(l+k)} \right]$$

$$= \lim_{l' \to \infty} \frac{\sqrt{l'+\frac{3}{2}}}{l'+1} \left[\frac{\Gamma(l'+\frac{3}{2})}{\Gamma(l'+1)} \right] = \lim_{l \to \infty} \frac{1}{\sqrt{W_l}}$$
(5.20)

Ya que el límite de W_l conduce a la fórmula de Wallis, la expresión anterior, ecuación 5.20, conduce al inverso de la raíz cuadrada de la fórmula de Wallis:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{W}_l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\sqrt{l + \frac{3}{2}}}{l + 1} \left[\frac{\Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(l + 1)} \right] = 1$$
 (5.21)

$$\lim_{l \to \infty} \sqrt{\frac{2l+3}{2}} \left[\frac{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{2l-1}{2} \cdot \frac{2l-3}{2} \dots \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}}{(l+1)(l)(l-1)\dots 3 \cdot 2 \cdot 1} \right] = 1$$
 (5.22)

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \lim_{l \to \infty} \sqrt{2l+3} \left[\frac{(2l+1) \cdot (2l-1) \cdot (2l-3) \dots 3 \cdot 1}{(2l+2)(2l)(2l-2) \dots 6 \cdot 4 \cdot 2} \right] = 1$$
 (5.23)

$$\lim_{l \to \infty} \prod_{j=1}^{l+1} \frac{(2j-1)\sqrt{2j+1}}{2j} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$
 (5.24)

Utilizando una condición que relaciona dos problemas hipotéticos: El átomo de hidrógeno y el oscilador armónico dados por H_{AHN} y H_{OA4} . Cortese y García demostraron la relación entre otro problema de campo central y la fórmula pre-newtoniana para π de la forma $\sqrt{2/\pi}$.

En el siguiente capítulo se discuten diferentes problemas de campo central no reportados en la literatura que podrían conducir a una fórmula tipo Wallis.

Capítulo 6

Potenciales de Campo Central

El presente capítulo se enfoca en torno a la física, el análisis y la solución de distintos problemas de campo central utilizando el método de aproximación de Nikiforov-Uvarov.

6.0.1. Quark-Antiquark

De acuerdo al Modelo Estándar, existen partículas subatómicas denominadas hadrones. Estos, a su vez, se encuentran conformados por partículas elementales denominadas quarks. Estas partículas, los quarks, fueron propuestas a mitad de 1960 con la finalidad de sistematizar la gran diversidad de particulas con interacción fuerte que se iban descubriendo. De acuerdo a este modelo, a partir de estas partículas elementales, es posible explicar las propiedades de los hadrones (carga eléctrica, masa, momento magnético, etc). Los quarks tienen diferentes propiedades sin análogo clásico *i.e.* sabor, carga de color, además de contar con antipartículas, denominadas antiquarks. El enlace de interacción entre quarks (o antiquarks), para conformar hadrones, se conoce como interacción fuerte. Esta interacción fundamental, en nuestro entendimiento actual, involucra el intercambio de una partícula: el gluón (Figura 6.1). Este fenómeno es análogo al intercambio de fotones entre particulas cargadas electricamente [27].

Kuchin y Maksimenko publicaron un trabajo donde utilizan el método de Nikiforov Uvarov para resolver un sistema que modela la interacción entre dos partículas elementales del modelo estándar: el quark y antiquark [28]. En el desarrollo de su trabajo consideran dos

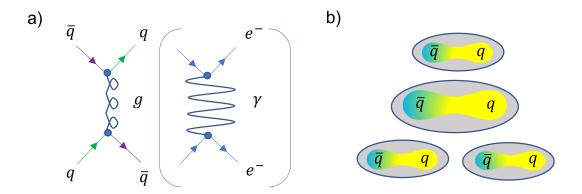


Figura 6.1: Representación pictagórica del a) intercambio de un gluón (similar al intercambio de un fotón entre electrones) y b) fenómeno de confinamiento entre un par quarkantiquark. q: quark, \tilde{q} : antiquark, g: gluón, e: electrón, γ : fotón

tipos de interacciones, la primera contribución U(r) = -b/r, predominante en distancias cortas, es el potencial inducido por un gluón que viaja de un quark a su antiquark. El gluón transmite la información de campo de la atracción nuclear fuerte. El segundo fenómeno predomina a distancias mayores U(r) = ar y se denomina confinamiento quark-antiquark (Figura 6.2). El potencial global de interacción que experimenta el quark y su antiquark está dado por,

$$U(r) = ar - \frac{b}{r}. (6.1)$$

Donde a y b son reales positivos y sus valores dependen de las características y propiedades del quark involucrado. La ecuación de Schrödinger que modela el sistema de Kuchin y Maksimenko está dada por,

$$H_{q\tilde{q}}\chi_{\alpha l}(r) = \frac{d^2}{dr^2}\chi_{\alpha l}(r) + \left[2\mu(E - ar + \frac{b}{r}) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_{\alpha l}(r) = 0$$
 (6.2)

donde $H_{q\tilde{q}}$ es el Hamiltoniano del sistema. A partir de la ecuación 6.2 los autores reescriben la ecuación de forma que cumpla con las condiciones de la ecuación diferencial de Nikiforov Uvarov (ecuación 3.11). Para ello introducen el cambio de variable x=1/r, donde se obtiene,

$$\frac{d^2}{dx^2}\chi_{\alpha l}(x) + \frac{2x}{x^2}\frac{d}{dx}\chi_{\alpha l}(x) + \frac{2\mu}{x^4}\left[E - \frac{a}{x} + bx - \frac{l(l+1)}{2\mu}x^2\right]\chi_{\alpha l}(x) = 0$$
 (6.3)

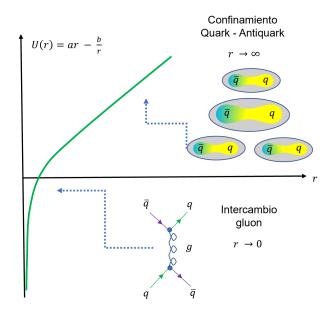


Figura 6.2: Representación pictagórica del potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$. El intercambio de gluon predomina para $r \to 0$, el confinamiento quark-antiquark predomina para $r \to \infty$. Las constantes a y b son reales positivos y sus valores dependen de las características y propiedades del quark involucrado.

Los autores proponen el siguiente argumento de aproximación respecto al término $\frac{a}{x}$: Se asume que existe un radio característico r_0 para el mesón (partícula conformada por el quark y antiquark), alrededor del cual se establece una aproximación en serie de potencias y se consideran los términos hasta segundo orden. Para ello, introducen las variables $\delta \equiv \frac{1}{r_0}$ y $y = x - \delta$. Bajo estas consideraciones se tiene,

$$\frac{a}{x} = \frac{a}{\delta \left(1 + \frac{y}{\delta}\right)} \approx \frac{a}{\delta} \left(1 - \frac{y}{\delta} + \frac{y^2}{\delta^2}\right) = \frac{a}{\delta^3} \left(3\delta^2 - 3\delta x + x^2\right) \tag{6.4}$$

Se sustituye 6.4 en la ecuación 6.3 y se obtiene:

$$\frac{d^2}{dx^2}\chi_{\alpha l}(x) + \frac{2x}{x^2}\frac{d}{dx}\chi_{\alpha l}(x) + \frac{2\mu}{x^4} \left[E - \frac{a}{\delta^3} (3\delta^2 - 3\delta x + x^2) + bx - \frac{l(l+1)}{2\mu} x^2 \right] \chi_{\alpha l}(x) = 0 \quad (6.5)$$

La expresión anterior, cumple con las condiciones de la ecuación diferencial de Nikiforov-Uvarov, a partir del cual se obtiene la expresión para la energía:

$$E_{N(nl)} = \frac{3a}{\delta} - \frac{2\mu(b + \frac{3a}{\delta})^2}{\{(2n+1) \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}$$
(6.6)

La función de onda correspondiente, obtenida por el mismo método es:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^{-\frac{B}{\sqrt{2A}} - 1} e^{\sqrt{2A}r} (-r^2 \frac{d}{dr})^n (r^{-2n + \frac{2B}{\sqrt{2A}}} e^{-2\sqrt{2A}r})$$
(6.7)

Donde $n = 0, 1, 2, \dots$ y N_{nl} es una constante de normalización.

El potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ (ecuación 6.1), a pesar de modelar un sistema distínto al átomo de hidrógeno, claramente se reduce al mismo para el caso donde a = 0 y la solución 6.6 reproduce las energías exactas del problema del átomo de hidrógeno. A pesar de que este problema no tiene solución exacta, *i.e.*, no está definida asintóticamente; la solución obtenida mediante un método de aproximación, se reduce al caso conocido del átomo de hidrógeno cuando a = 0.

Por otra parte, Al-Jamel y Hatem Widyan [29] reportan la solución de un problema de campo central, que de igual forma considera el potencial inducido por un gluón y el confiniamiento quark-antiquark. La diferencia entre el potencial descrito por Kuchin y Maksimenko respecto a este nuevo potencial consiste en un confinamiento parabólico (Figura 6.3),

$$U(r) = -\frac{b}{r} + cr^2 \tag{6.8}$$

Donde b y c son reales positivos y sus valores dependen de las características y propiedades del quark involucrado. Para este potencial, el espectro de energía obtenido a partir del método de Nikiforov Uvarov, utilizando la misma aproximación en torno a un radio crítico $\delta \equiv \frac{1}{r_0}$ es,

$$E_{N2(nl)} = \frac{6b}{\delta^2} - \frac{2\mu(c + \frac{8b}{\delta^3})}{\left[2n + 1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{24\mu b}{\delta^4}}\right]^2}$$
(6.9)

El potencial de Al-Jamel y Hatem Widyan, se reduce al problema del átomo de hidrógeno o al oscilador armónico, para los casos c=0 ó b=0 en 6.8 respectivamente. Para el primer caso (c=0), de 6.9 se obtiene la energía exacta del átomo de hidrógeno; para el segundo caso (b=0) se obtiene una expresión en términos de δ , parámetro obtenido

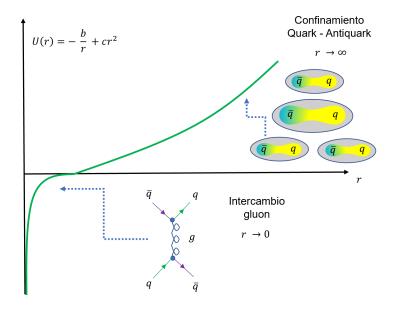


Figura 6.3: Representación pictagórica del potencial $U(r) = -\frac{b}{r} + cr^2$. El intercambio de gluon predomina para $r \to 0$, el confinamiento quark-antiquark predomina para $r \to \infty$. Las constantes b y c son reales positivos y sus valores dependen de las características y propiedades del quark involucrado.

experimentalmente.

Existen diferentes expresiones análiticas para el espectro energético de los potenciales $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ y $U(r) = -\frac{b}{r} + cr^2$. De este conjunto de expresiones, las soluciones analíticas obtenidas por el método de Nikiforov-Uvarov son las que presentan mayor similitud con los datos experimentales. Las tablas 6.1 y 6.2 contienen el espectro de masas de dos mesones, el charmonium y el bottomonium respectivamente. Estos mesones son modelados por el potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ y los valores de las tablas fueron determinados por diferentes métodos de aproximación y por datos experimentales. La segunda columna NU (Nikiforov-Uvarov), contiene el espectro de masas para diferentes estados energéticos de los mesones obtenido mediante el método de Nikiforov-Uvarov. Nótese su similitud con los datos experimentales 1 .

¹El espectro de masas se determina a partir de la relación $M=m_q+m_{\tilde{q}}+E$ donde m_q es la masa del quark, $m_{\tilde{q}}$ es la masa del antiquark y E es el espectro energético del sistema.

- 0.201dev)								
Estado	NU [28]	FGTV [30]	KC [31]	AW [29]	Experimento [32]			
1S	3.096	3.068	3.078	3.096	3.096			
1P	3.255	3.526	3.415	3.433				
2S	3.686	3.697	3.581	3.686	3.686			
1D	3.504	3.829	3.749	3.767				
2P	3.779	3.993	3.917	3.910	3.773			
3S	4.040	4.144	4.085	3.984	4.040			
4S	4.269		4.589	4.150	4.263			
5S	4.425				4.421 ± 0.004			

Tabla 6.1: Espectro de masa del charmonium (GeV) ($m_c = 1.209 GeV, a = 0.2 GeV, b = 1.244, \delta = 0.231 GeV$)

Tabla 6.2: Espectro de masa del botttomonium (en unidades de GeV) ($m_b = 4.823 GeV, a = 0.2 GeV, b = 1.569, \delta = 0.378 GeV$)

Estado	NU [28]	FGTV [30]	KC [31]	AW [29]	Experimento [32]
1S	9.460	9.447	9.510	9.460	9.460
1P	9.619	9.900	9.862	9.840	
2S	10.023	10.012	10.038	10.023	10.023
1D	9.864	10.155	10.214	10.140	
2P	10.114	10.260	10.390	10.160	
3S	10.355	10.353	10.566	10.280	10.355
4S	10.567	10.629	11.094	10.420	10.580

6.0.2. Potencial Pöschl-Teller

El potencial de Pöschl-Teller se utiliza con frecuencia para describir oscilaciones anarmónicas en moléculas vibracionales, semiconductores a nanoescala, puntos cuánticos, etc. La representación matemática del potencial es,

$$V(r) = \frac{1}{2}V_0 \left[\frac{\alpha(\alpha - 1)}{\sinh^2(\beta r)} + \frac{\lambda(\lambda - 1)}{\cosh^2(\beta r)} \right],$$
(6.10)

con V_o , α , β , y λ constantes. Agboola [33] reportó cómo resolver la ecuación N-dimensional radial de Schrödinger con un potencial tipo Pöschl-Teller de la forma 6.4,

$$V(r) = -\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha r)} \tag{6.11}$$

a través del método de Nikiforov-Uvarov. Agboola parte de la ecuación:

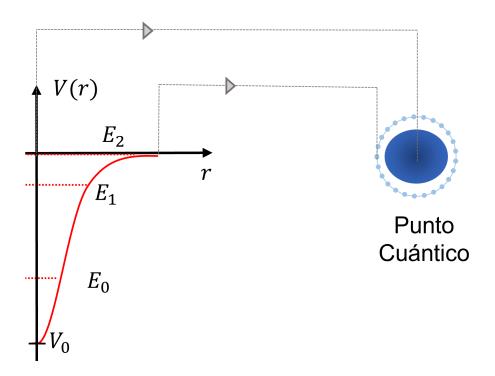


Figura 6.4: Representación pictagórica del potencial Pöschl-Teller tipo $-\frac{V_0}{\cosh^2\beta r}$. Potencial utilizado para describir puntos cuánticos, oscilaciones anarmónicas, etc. Las constantes V_o y β son la amplitud y frecuencia de la función $\cosh(r)$ respectivamente.

$$R_{n_r l}''(r) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{V_0}{\cosh^2(\alpha r)}\right) - \frac{(k-1)(k-3)}{4r^2}\right] R_{n_r l}(r) = 0$$
 (6.12)

donde k = N + 2l, N es la dimensionalidad del problema y $R''_{n_r l}(r)$ representa la segunda derivada de la función de onda radial $R_{n_r l}$. Para valores pequeños de α , se aproxima el término potencial centrífugo como,

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{\alpha^2}{\sinh^2(\alpha r)} \tag{6.13}$$

Bajo esta aproximación, se reescribe la ecuación 6.12 y toma la forma,

$$R_{n_r l}''(r) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{V_0}{\cosh^2(\alpha r)}\right) - \frac{(k-1)(k-3)\alpha^2}{4\sinh^2(\alpha r)}\right] R_{n_r l}(r) = 0$$
 (6.14)

Ahora es conveniente hacer un cambio de variable de la forma $s = \tanh^2(\alpha r)$ en la ecuación anterior resultando la ecuación diferencial,

$$R_{n_r l}''(s) + \frac{1 - 3s}{2s(1 - s)} R_{n_r l}'(s) + \frac{1}{4s^2(1 - s)^2} \left[-\delta s^2 + \left(\gamma + \delta - \varepsilon^2\right)s - \gamma\right] R_{n_r l}(s) = 0 \quad (6.15)$$

donde hemos definido las constantes,

$$-\varepsilon^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2 \alpha^2}; \qquad \delta = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 \alpha^2}; \qquad \gamma = \frac{1}{4}(k-1)(k-3). \tag{6.16}$$

La ecuación 6.15 cumple con las condiciones de la ecuación diferencial del método de Nikiforov Uvarov, a partir de la cual se obtiene una expresión analítica para el espectro de energía del potencial Pöschl-Teller,

$$E_{n_r l} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\mu} \left[-2(2n_r + l + \frac{N}{2}) + \sqrt{1 + \frac{8\mu V_0}{\hbar^2 \alpha^2}} \right]^2$$
 (6.17)

En las secciones anteriores se comentó diferentes trabajos relacionados al artículo de Friedmann y Hagen, asi como la física, el análisis y solución de diferentes problemas de campo central. Con esta información, en el siguiente capítulo, se determinará el espectro de energías de distintos problemas de campo central utilizando el método variacional.

Capítulo 7

Resultados y Análisis

7.1. Potencial quark-antiquark

Como se mencionó anteriormente el potencial de Kuchin y Maksimenko $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ (ecuación 6.1) describe dos interacciones, el potencial inducido por el intercambio de un gluón y el confinamiento de un par quark-antiquark. A continuación se reporta el procedimiento de un cálculo variacional aplicado al sistema descrito por Kuchin y Maksimenko, donde la ecuación de Schrödinger que utilizan está dada por $H_{q\tilde{q}}$ (ecuación 6.3). Se utiliza la aproximación en torno a un radio crítico r_0 para el término ar del potencial, de forma que se reescribe la ecuación como,

$$-\frac{x^4\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dx^2} \chi_{\alpha l}(x) + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} \chi_{\alpha l}(x) \right] + \left[Cx^2 - Bx + A \right] \chi_{\alpha l}(x) = E\chi_{\alpha l}(x)$$
 (7.1)

donde $A = \frac{3a}{\delta}$, $B = (b + \frac{3a}{\delta^2})$ y $C = (\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu} + \frac{a}{\delta^3})$. Para el método variacional se utilizó la función prueba Gaussiana de Friedmann y Hagen. Considerando los cambios del variable del problema i.e., $\chi_{\alpha l}(r) = rR_{\alpha l}(r)$; $R_{\alpha l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2}$ y $x = \frac{1}{r}$, la función prueba toma la forma,

$$\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)} e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$$
(7.2)

A partir de esta función prueba 7.2, un cálculo variacional para determinar el espectro de energía del problema $H_{q\tilde{q}}$ produce el valor de expectación,

$$\frac{\langle \chi_{\alpha l}(x) | H_{q\tilde{q}} | \chi_{\alpha l}(x) \rangle}{\langle \chi_{\alpha l}(x) | \chi_{\alpha l}(x) \rangle} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[l(l+1) \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} - l - \frac{1}{2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} C \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right] (2\alpha)$$

$$+ B \frac{(2\alpha)^{\frac{1}{2}} \Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} - A$$
(7.3)

En este caso el diferencial de volumen es $dV = r^2 dr d\theta \phi$. El mínimo de energía está dado por el parámetro α dado por,

$$\sqrt{\alpha} = \frac{\frac{B}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}}{\Omega_l} \tag{7.4}$$

donde se ha definido la constante Ω_l

$$\Omega_l = \frac{\hbar^2}{\mu} \left[l(l+1) \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} - l - \frac{1}{2} - 2\mu C \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right]. \tag{7.5}$$

En conjunto, el valor de expectación de la energía basal está dado por,

$$\langle H_T \rangle_{ab}^{\alpha_{min}} = \frac{\left[B \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right]^2}{2\Omega_l} + A. \tag{7.6}$$

A continuación se analizará el caso cuando el potencial se reduce al átomo de hidrógeno, donde se espera que la solución 7.6 se aproxime al valor de la energía exacta del estado base del mismo.

7.1.1. Potencial Quark-Antiquark en el límite $a \to 0$

El sistema conformado por el quark y antiquark no cuenta con una solución exacta, sin embargo, para el caso donde el potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ se reduce al potencial del átomo de hidrógeno (a=0), el valor de expectación de la ecuación 7.6 debe aproximarse al resultado exacto del problema. Para ello se establece a=0, $b=e^2$ y se considera $\Omega_{a=0}=(l+\frac{1}{2})/\mu$ donde e y μ representan la carga del electrón y la masa reducida respectivamente. El valor esperado $\langle H_T \rangle_{ab}^{\alpha_{min}}$ (ecuación 7.6) se reduce a,

$$\langle H_T \rangle_{a=0}^{\alpha_{min}} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \left[\frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right]^2 \frac{1}{(l+\frac{1}{2})}$$
 (7.7)

Se establece una razón entre el resultado 7.7 y la energía basal del átomo de hidrógeno $E_{0,l} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \frac{1}{(l+1)^2} \text{ (ecuación 4.12) a partir de la cual se obtiene,}$

$$\frac{\langle H_T \rangle_{a=0}^{\alpha_{min}}}{E_{0,l}} = \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{1}{2})} \left\{ \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right\}^2 -$$
 (7.8)

La razón anterior se puede reescribir en términos del cociente W_l , lo que arroja la expresión

$$\frac{\langle H_T \rangle_{a=0}^{\alpha_{min}}}{E_{0,l}} = \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})} \mathcal{W}_l$$
 (7.9)

ya que el límite de W_l cuando $l \to \infty$ tiende a uno, el límite del cociente $\frac{\langle H \rangle_{a=0}^{\alpha_{min}}}{E_{0,l}}$, también tiende a uno, veamos:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_T \rangle_{a=0}^{\alpha_{min}}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})} \mathcal{W}_l$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})} \lim_{l \to \infty} \mathcal{W}_l$$
(7.10)

$$=\lim_{l\to\infty}\mathcal{W}_l=1$$

A partir del límite del coeficiente W_l cuando $l \to \infty$, se deriva la fórmula de Wallis (ver 4.15 - 4.19). Por ello, se obtiene un resultado proporcional a la solución del átomo de hidrógeno reportada por Friedmann y Hagen a partir de un cálculo variacional. A continuación se analiza el caso cuando $a \neq 0$ y b = 0 en el potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$.

7.1.2. Potencial Quark-Antiquark en el límite $b \to 0$

Bajo la consideración de un potencial que modela únicamente el fenómeno de confinamiento quark-antiquark, el potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ se reduce a U(r) = ar. Para este caso el valor esperado $\langle H_T \rangle_{ab}^{\alpha_{min}}$ (ecuación 7.6) se reduce a:

$$\langle H_T \rangle_{b=0}^{\alpha_{min}} = \frac{\left(\frac{3a}{\delta^2}\right)^2 \left[\frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}\right]^2}{2\Omega_{b=0}} + \frac{3a}{\delta}$$
 (7.11)

donde $\Omega_{l(b=0)}$ es explícitamente,

$$\Omega_{l(b=0)} = -\frac{1}{\mu} \left[-l(l+1) \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} + l + \frac{1}{2} + 2\mu C \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right].$$
 (7.12)

La energía obtenida por el método de Nikiforov-Uvarov se utiliza como referencia para el caso particular donde b=0. De forma que la solución obtenida por el método de Nikiforov-Uvarov para el potencial $U(r)=ar-\frac{b}{r}$ cuando b=0 está dada por,

$$E_{0,l}^{b=0} = -\frac{2\mu(\frac{3a}{\delta^2})^2}{\left[1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\right]^2} + \frac{3a}{\delta}$$
 (7.13)

De nuevo establecemos un cociente entre la soluciones $\langle H_T \rangle_{b=0}^{\alpha_{min}}$ (ecuación 6.11) y $E_{0,l}^{b=0}$ (ecuación 7.13), donde se obtiene,

$$\frac{\langle H_T \rangle_{b=0}^{\alpha_{min}}}{E_{0,l}^{b=0}} = \frac{\frac{\left(\frac{3a}{\delta^2}\right)^2 \left[\frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}\right]^2}{2\Omega_{b=0}} + \frac{3a}{\delta}}{-\frac{2\mu(\frac{3a}{\delta^2})^2}{\left[1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\right]^2} + \frac{3a}{\delta}}$$
(7.14)

Si ahora reacomodamos los términos de la ecuación anterior de forma que, del lado derecho queden todos los términos dependientes de la variable l, llegamos a,

$$\frac{\frac{\langle H_T \rangle_{b=0}^{\alpha_{min}} - \frac{3a}{\delta}}{(\frac{3a}{\delta^2})^2}}{\frac{E_{0,l}^{b-3} - \frac{3a}{\delta}}{(\frac{3a}{\delta^2})^2}} = \frac{\left[1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\right]^2}{4\left[l + \frac{1}{2} + 2\mu\frac{a}{\delta^3}\frac{1}{l+3/2}\right](l + \frac{3}{2})} \frac{(l+1)^2}{(l + \frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l + \frac{3}{2})}\right]^2 \tag{7.15}$$

Es importante hacer notar que el cociente anterior es adimensional. La expresión anterior puede reescribirse en términos del cociente W_l de forma que,

$$\frac{\frac{\langle H_T \rangle_{b=0}^{\alpha_{min}} - \frac{3a}{\delta}}{(\frac{3a}{\delta^2})^2}}{\frac{E_{0,l}^{0,l} - \frac{3a}{\delta}}{(\frac{3a}{\delta^2})^2}} = \frac{\left[1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\right]^2}{4\left[l + \frac{1}{2} + 2\mu \frac{a}{\delta^3} \frac{1}{l+3/2}\right](l + \frac{3}{2})} \mathcal{W}_l$$
(7.16)

El cociente W_l reaparece en este problema donde consideramos un caso diferente al átomo de hidrógeno *i.e.*, $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ cuando b = 0. Si en el cociente anterior, todos los términos diferentes de W_l tienden a uno, entonces será posible derivar la fórmula de Wallis para π en el caso del confinamiento quark-antiquark. Considerando el límite $l \to \infty$, en el cociente anterior:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\frac{\langle H_T \rangle_{b=0}^{\alpha_{min}} - \frac{3a}{\delta}}{(\frac{3a}{\delta^2})^2}}{\frac{E_{0,l}^{b=0} - \frac{3a}{\delta}}{(\frac{3a}{\delta^2})^2}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\left[1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\right]^2}{4\{l + \frac{1}{2} + 2\mu \frac{a}{\delta^3} \frac{1}{l+3/2}\}(l + \frac{3}{2})} \lim_{l \to \infty} \mathcal{W}_l = 1$$
 (7.17)

El límite anterior tiende a la unidad ya que el cociente $\frac{\{1\pm\sqrt{1+4l(l+1)+\frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}{4\{l+\frac{1}{2}+2\mu\frac{a}{\delta^3}\frac{1}{l+3/2}\}(l+\frac{3}{2})}$, el polinomio de mayor grado es $4l^2$ tanto en numerador como denominador. En el límite $\lim_{l\to\infty}\frac{\{1\pm\sqrt{1+4l(l+1)+\frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}{4\{l+\frac{1}{2}+2\mu\frac{a}{\delta^3}\frac{1}{l+3/2}\}(l+\frac{3}{2})}$ tanto numerador como denominador tienen a $4l^2$ y se cancelan. Finalmente el límite de \mathcal{W}_l cuando $l\to\infty$ es el cociente a partir del cual derivamos la fórmula de Wallis.

El cociente entre el valor esperado y la energía exacta para los casos asintóticos donde $a, b \to 0$ para el potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$ es proporcional al cociente W_l . Ya que W_l apareció en los casos asintóticos de este problema, se analizar el caso genérico.

7.1.3. Potencial Quark-Antiquark en el caso general $(a, b \neq 0)$

A coninuación se analiza el caso genérico, donde se considera la contribución del potencial inducido por el gluón y el confinamiento quark-antiquark. Reescribiendo el valor esperado de la energía obtenida a partir de un cálculo variacional, (ecuación 7.6):

$$\langle H_T \rangle_{\alpha}^{min} = \frac{\left[(b + \frac{3a}{\delta^2}) \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right]^2}{2\Omega_l} + \frac{3a}{\delta}$$

$$(7.18)$$

donde Ω_l para este caso tiene ahora la forma exc
plícita,

$$\Omega_l = \frac{1}{\mu} \left[l(l+1) \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} - l - \frac{1}{2} - 2\mu \left(\frac{l(l+1)}{2\mu} + \frac{a}{\delta^3} \right) \frac{\Gamma(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right]$$
(7.19)

Se establece un cociente entre $\langle H_T \rangle_{\alpha}^{min}$ y la energía obtenida por el método de Nikiforov Uvarov (ecuación 6.6) obteniendo:

$$\frac{\langle H_T \rangle_{\alpha}^{min}}{E_{N(0,l)}} = \frac{\frac{[(b + \frac{3a}{\delta^2})\frac{\Gamma(l+\frac{2}{\delta})}{\Gamma(l+\frac{5}{\delta})}]^2}{\frac{2\Omega_l}{\delta} + \frac{3a}{\delta}}}{\frac{2\mu(b + \frac{3a}{\delta})^2}{\{(2n+1)\pm\sqrt{1+4l(l+1)+\frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}}$$
(7.20)

Rescribiendo el cociente anterior donde los términos dependientes de l se encuentren del lado derecho:

$$\frac{\frac{\langle H \rangle_{b=0}^{\alpha_{min}} - \frac{3a}{\delta}}{(b + \frac{3a}{\delta^2})^2}}{\frac{E_{0,l}^{b=0} - \frac{3a}{\delta}}{(b + \frac{3a}{\delta^2})^2}} = \frac{\{1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}{4\{l + \frac{1}{2} + 2\mu \frac{a}{\delta^3} \frac{1}{l+3/2}\}(l + \frac{3}{2})} \frac{(l+1)^2}{(l + \frac{3}{2})} \{\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l + \frac{3}{2})}\}^2} \tag{7.21}$$

La razón anterior se reescribe en términos del cociente W_l :

$$\frac{\langle H_T \rangle_{a=0}^{\alpha_{min}}}{E_{0,l}} = \frac{\left\{1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\right\}^2}{4\left\{l + \frac{1}{2} + 2\mu \frac{a}{\delta^3} \frac{1}{l+3/2}\right\}(l + \frac{3}{2})} \mathcal{W}_l$$
 (7.22)

Determinando el límite cuando $l \to \infty$ en el cociente anterior:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_T \rangle_{a=0}^{\alpha_{min}}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\{1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}{4\{l + \frac{1}{2} + 2\mu \frac{a}{\delta^3} \frac{1}{l+3/2}\}(l + \frac{3}{2})} \lim_{l \to \infty} \mathcal{W}_l$$
 (7.23)

El límite anterior tiende a la unidad ya que el cociente $\frac{\{1\pm\sqrt{1+4l(l+1)+\frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}{4\{l+\frac{1}{2}+2\mu\frac{a}{\delta^3}\frac{1}{l+3/2}\}(l+\frac{3}{2})}$, el polinomio de mayor grado es $4l^2$ tanto en numerador como denominador. Similar al caso anterior, en el límite $\lim_{l\to\infty}\frac{\{1\pm\sqrt{1+4l(l+1)+\frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}{4\{l+\frac{1}{2}+2\mu\frac{a}{\delta^3}\frac{1}{l+3/2}\}(l+\frac{3}{2})}$, el polinomio de mayor grado es $4l^2$ tanto numerador como denominador tienen a $4l^2$ y se cancelan. Finalmente el límite de \mathcal{W}_l cuando $l\to\infty$ es el cociente a partir del cual derivamos la fórmula de Wallis.

De esta forma se demuestra otro problema de campo central, que conduce a la fórmula de Wallis. Utilizando una función prueba de tipo Gaussiana y la derivación se mantiene incluso en los casos donde a ó $b \neq 0$ en el potencial $U(r) = ar - \frac{b}{r}$.

A continuación se muestran los resultados y análisis de determinar el espectro de ener-

gías de un sistema conformado por un par quark-antiquark cuyo fenómeno de confinamiento tiene una dependencia cuadrática.

7.2. Potencial quark-antiquark: Confinamiento cuadrático

En la presente sección, se reporta el resultado de un cálculo variacional aplicado al potencial de Al-Jamel y Hatem Widyan donde $U(r) = -\frac{b}{r} + cr^2$. Como se observa del potencial, la dependencia cuadrática del confinamiento quark-antiquark indica una fuerza de atracción mayor entre par quark-antiquark conforme aumenta la distancia de separación. Similar al potencial $U(r) = -\frac{b}{r} + ar$, existe una distancia de equilibrio entre el par quark-antiquark, sin embargo, en el potencial $U(r) = -\frac{b}{r} + cr^2$ esta distancia de equilibrio es menor. Al-Jamel y Hatem Widyan parten de la ecuación radial de Schrödinger:

$$\frac{d^2}{dr^2}\chi_{\alpha l}(r) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{b}{r} - ar^2\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] \chi_{\alpha l}(r) = 0$$
 (7.24)

donde $\chi_{\alpha l}(r) = rR_{n,l}(r)$ y $R_{n,l}(r)$ es la función prueba. Se introduce un cambio de variables de la forma x = 1/r, a partir del cual la ecuación anterior se reescribe como:

$$\frac{d^2}{dx^2}\chi_{\alpha l}(x) + \frac{2x}{x^2}\frac{d}{dx}\chi_{nl}(x) + \frac{2\mu}{x^4\hbar^2}(E + bx - \frac{a}{x^2} - \frac{l(l+1)}{2\mu}x^2)\chi_{\alpha l}(x) = 0$$
 (7.25)

A continuación se realiza una aproximación respecto al término $\frac{a}{x^2}$. Se considera un radio característico (o distancia de equilibrio del par quark-antiquark) r_0 , para el mesón modelado por el potencial quark-antiquark con confinamiento cuadrático. Alrededor de este radio crítico, se establece una aproximación en serie de potencias y se consideran los términos hasta segundo orden. Para ello introducen las variables $\delta \equiv \frac{1}{r_0}$ y $y = x - \delta$. A partir de esta aproximación tenemos,

$$\frac{b}{x^2} = \frac{b}{(\delta + y)^2} \approx \frac{b}{\delta} \left(1 - 2\frac{y}{\delta} + 3\left(\frac{y}{\delta}\right)^2 \right) = \frac{b}{\delta^4} \left(6\delta^2 - 8\delta x + 3x^2 \right) \tag{7.26}$$

Se sustituye la aproximación del término $\frac{b}{x^2}$ en la ecuación 6.25 y sea $A=\left(\frac{6a}{\delta^2}\right),\,B=\left(b+\frac{8a}{\delta^3}\right)$ y $C=\left(\frac{l(l+1)}{2}+\frac{3a}{\delta^4}\right)$, a partir del cuál obtenemos,

$$\frac{d^2}{dx^2}\chi_{\alpha l}(x) + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}\chi_{\alpha l}(x) + -\frac{2\mu}{x^4\hbar^2}[Cx^2 - Bx + A]\chi_{\alpha l}(x) = E\chi_{\alpha l}(x)$$
 (7.27)

Utilizando la función prueba $\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$ donde $\chi_{\alpha l}(r) = rR_{n,l}(r)$, $R_{n,l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2}$ donde $R_{n,l}(r)$ es la función gaussiana utilizada por Friedmann y Hagen. Determinando el valor esperado y el valor mínimo para la energía a partir de un cálculo variacional, considerando la función prueba $\chi_{\alpha l}(x)$, para la ecuación 7.27,

$$\langle H_{T2} \rangle_{\alpha}^{min} = \frac{\left[B \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \right]^2}{2\Omega_l} + A \tag{7.28}$$

donde Ω_l dado por la ecuación 7.19. En la siguiente sección, se analiza el comportamiento del cociente entre el valor esperado $\langle H_{T2}\rangle_{\alpha}^{min}$ y la solución obtenida por el método de Nikiforov-Uvarov para el potencial $U(r)=-\frac{b}{r}+cr^2$.

7.2.1. Potencial Quark-Antiquark con confinamiento cuadrático en el caso general $(b, c \neq 0)$

A partir de un cálculo variacional con la función prueba $\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$ se obtuvo una expresión para el espectro energético de un sistema conformado por un quark y un antiquark, $\langle H_{T2}\rangle_{\alpha}^{min}$. A contnuación definimos un cociente entre $\langle H_{T2}\rangle_{\alpha}^{min}$ y la energía $E_{N2(nl)}$ (ecuación 5.33), obtenida por el método de Nikiforov Uvarov. El cociente es:

$$\frac{\frac{\langle H \rangle^{\alpha_{\min} - \frac{6a}{\delta^2}}}{(b + \frac{8a}{\delta^3})^2}}{\frac{E_{0,l} - \frac{6a}{\delta^2}}{(b + \frac{8a}{\delta^3})^2}} = \frac{\left[1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{24\mu a}{\delta^4}}\right]^2 (l+1)^2}{4\left(l + \frac{1}{2} + 2\mu \frac{3a}{\delta^4} \frac{1}{l+3/2}\right)(l + \frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l + \frac{3}{2})}\right]^2 \tag{7.29}$$

notar que todos los términos dependientes de l se encuentran en el lado derecho en el cociente anterior (similar a la ecuación 7.21), adicionalmente este cociente es proporcional a W_l . Considerando el límite cuando $l \to \infty$ del cociente anterior nos produce,

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\frac{\langle H \rangle^{\alpha_{min}} - \frac{6a}{\delta^2}}{(b + \frac{8a}{\delta^3})^2}}{\frac{E_{0,l} - \frac{6a}{\delta^2}}{(b + \frac{8a}{\delta^3})^2}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\{1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{24\mu a}{\delta^4}}\}^2}{4\{l + \frac{1}{2} + 2\mu \frac{3a}{\delta^4} \frac{1}{l+3/2}\}(l + \frac{3}{2})} \lim_{l \to \infty} W_l = 1$$
 (7.30)

Sabemos que W_l tiende a uno en el límite $l \to \infty$ y que a partir de este cociente, es posible derivar la fórmula de Wallis. Por otro lado en el cociente $\frac{\{1\pm\sqrt{1+4l(l+1)+\frac{24\mu a}{\delta^4}}\}^2}{4\{l+\frac{1}{2}+2\mu\frac{3a}{\delta^4}\frac{1}{l+3/2}\}(l+\frac{3}{2})}$, tanto númerados como denominador tienen a $4l^2$ como polinomio de mayor grado. El límite de este cociente tiende a la unidad.

Recapitulando, en el caso donde a=0, el cociente 7.30 sigue conduciendo a la fórmula de Wallis. Lo mismo sucede cuando analizamos el caso b=0 en 7.30. En ambos casos obtenemos el límite lím $_{l\to\infty} \mathcal{W}_l$ que conduce a la fórmula de Wallis. A partir de la suposición de un radio crítico r_0 y utilizando una función prueba tipo gaussiana $\chi_{\alpha l}(x)=x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$, se obtuvo la fórmula de Wallis para un potencial quark-antiquark con confinameinto cuadrático.

7.3. Interpretación física del producto de Wallis

En el análisis del átomo de hidrógeno, Friedmann y Hagen obtienen una aproximación del espectro energético del problema. Se utiliza el cociente W_l para determinar la precisión de esta aproximación con el valor exacto de la energía más baja del sistema. Este cociente, dependiente del número cúantico angular l, se aproxima a la unidad en el límite $l \to \infty$ 1. Esta tendencia a la unidad es consecuencia que en el límite $l \to \infty$, la solución prueba de Friedmann y Hagen y el resultado exacto del átomo de hidrógeno, corresponden estrictamente a orbitales circulares. La "redondez" o circularidad de las orbitas soluciones de la función prueba es consecuencia de la incertidumbre en r^2 (medida en unidades del radio medio al cuadrado, $\langle r^2 \rangle_{\alpha,l}$, dada por la expresión:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\sqrt{\langle r^4 \rangle_{\alpha l} - (\langle r^2 \rangle_{\alpha l})^2}}{\langle r^2 \rangle_{\alpha l}} = \lim_{l \to \infty} \left(l + \frac{3}{2} \right)^{-\frac{1}{2}} = 0 \tag{7.31}$$

Que se aproxima a cero a medida que l aumenta de valor. Es decir, las soluciones para

¹i.e., para l = 0, 1, 2, 10, 100 el cociente W_l toma los valores 0.899, 0.906, 0.932, 0.971, 0.998 respectivamente (Ver Figura 4.1).

las orbitas exactas y las que resultan de las funciones prueba son idénticas a aquellas que corresponden al modelo de Bohr en el límite $l \to \infty$ como se esperaría por el principio de correspondencia de Bohr [9].

7.4. Análisis matemático de la fórmula de Wallis

Desde el punto de vista puramente matemático, lo que se desprende de nuestros cálculos y análisis es que la derivación de la fórmula de Wallis en problemas de campo central, no depende de una forma única de la función prueba, si no que más bien es resultado de la forma particular de ecuación diferencial involucrada que satisface criterios específicos, como es el caso de la ecuación diferencial de Nikiforov-Uvarov.

Como se mencionó en la Capítulo 3 de este trabajo de tesis, el método de Nikiforov-Uvarov es un método matemático para resolver ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden. La ecuación a resolver en el método de Nikiforov-Uvarov tiene la forma,

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi' + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi = 0$$
 (7.32)

donde $\sigma(s)$ y $\tilde{\sigma}(s)$ son polinomios de máximo segundo orden, $\tilde{\tau}(s)$ un polinomio de máximo primer orden y la forma de la función $\psi(s)$ solución general a tal ecuación es función de tipo hipergeométrica. A continuación, se analiza el comportamiento asintótico de la ecuación de Nikiforov-Uvarov, con el propósito de determinar si tiene alguna relación con la derivación de la fórmula de Wallis para π .

7.4.1. Fórmula de Wallis en el método de Nikiforov-Uvarov

Empezamos por reescribir la ecuación de Nikiforov-Uvarov de la forma general,

$$\psi''(x) + \frac{Zx + Y}{Xx^2 + Wx + V}\psi'(x) + \frac{Ux^2 + Tx + S}{\left[Xx^2 + Wx + V\right]^2}\psi(x) = 0$$
 (7.33)

donde suponemos que el cambio de variable $s \to x$ es válido para la ecuación de Nikiforov-Uvarov, donde $x = \frac{1}{r}$ y los parámetros Z, Y, X, W, V, U, T, S toman valores constantes.

Si analizamos el caso donde $r \to \infty$ (i.e. $x \to 0$), el comportamiento asintótico de la ecuación 7.33 es tal que se satisface

$$\frac{Ux^2 + Tx + S}{\left[Xx^2 + Wx + V\right]^2}\psi(x) = 0$$
 (7.34)

Por lo que podemos escribir

$$A_{NU}\psi(x) = 0 (7.35)$$

Donde $A_{NU}=Ux^2+Tx+S$. Note que el valor esperado normalizado $\langle A_{NU}\rangle/\langle \psi|\psi\rangle$ también es igual a cero. Ahora utilizamos la función prueba $\psi(x)=\chi_{\alpha l}(x)=x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$, lo que nos conduce a

$$\frac{\langle A_{NU} \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \equiv \frac{\langle \chi_{\alpha l}(x) | Ux^2 + Tx + S | \chi_{\alpha l}(x) \rangle}{\langle \chi_{\alpha l}(x) | \chi_{\alpha l}(x) \rangle} = 0 \tag{7.36}$$

$$= S - \sqrt{2\alpha} \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} T + \frac{U}{(l+\frac{3}{2})} (2\alpha) = 0$$
 (7.37)

El valor de α que da el "mínimo" en $\langle A_{NU} \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ es

$$\sqrt{2\alpha} = \frac{T}{2U} \frac{\Gamma(l+2)(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}$$

$$(7.38)$$

Ahora se sustituye el valor de α de 7.38 en 7.37 que al reacomodar términos nos produce la ecuación a partir del cual se obtiene el resultado

$$\frac{SU}{T^2} = \frac{(l+1)^2}{4(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^2 = \frac{1}{4} \mathcal{W}_l$$
(7.39)

Como se ha mencionado anteriormente, el límite cuando $l \to \infty$ en W_l , lado derecho de la expresión anterior, permite derivar la fórmula de Wallis. Si los términos S, U y T del lado izquierdo en la expresión 7.39 no dependen del número cuántico angular l, basta evaluar el límite cuando $l \to \infty$ para obtener una fórmula tipo Wallis.

Como ejemplo, en la siguiente sección, se utiliza este comportamiento asintótico de la ecuación de Nikiforov Uvarov para el problema del átomo de hidrógeno y para el potencial

tipo Pösch-Teller utilizando 7.39 para derivar, en caso de ser posible, una fórmula de Wallis.

7.5. La fórmula de Wallis en el átomo de hidrógeno: comportamiento asintótico de la ecuación NU

Escribimos la ecuación del átomo de hidrógeno en términos de la ecuación de Nikiforov-Uvarov (ver Apéndice B.1) donde suponemos que el cambio de variable $s \to x$ es válido.

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}\psi(x) + \frac{1}{x^2}[-\tilde{\alpha}x^2 + \beta x - \gamma]\psi(x) = 0$$
 (7.40)

donde $\tilde{\alpha} = -2E\mu/\hbar^2$, $\beta = 2\mu e^2/\hbar^2$ y $\gamma = l(l+1)$. Se limita el problema a la energía de los estados ligados, de forma que el parámetro $\tilde{\alpha}$ es positivo.

Utilizamos la función prueba de la forma $\psi(x) = \chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$ para realizar un cálculo variacional. Considerando el comportamiento asintótico de la ecuación 7.51 cuando $x \to 0$ obtenemos,

$$\frac{1}{x^2}\left[-\tilde{\alpha}x^2 + \beta x - \gamma\right]\psi(x) = 0\tag{7.41}$$

Se determina el valor de expectación $\frac{\langle A_{NU} \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle},$ ecuación 7.36

$$\frac{\langle A_{NU} \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \equiv \frac{\langle \chi_{\alpha l}(x) | -\tilde{\alpha}x^2 + \beta x + -\gamma | \chi_{\alpha l}(x) \rangle}{\langle \chi_{\alpha l}(x) | \chi_{\alpha l}(x) \rangle} = 0 \tag{7.42}$$

$$= -\gamma - \sqrt{2\alpha} \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \beta - \frac{\tilde{\alpha}}{(l+\frac{3}{2})} (2\alpha) = 0$$
 (7.43)

El valor de α que da el "mínimo" en $\langle A_{NU} \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ es,

$$\sqrt{2\alpha} = -\frac{\beta}{2\tilde{\alpha}} \frac{\Gamma(l+2)(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}$$
(7.44)

Sustituyendo $\sqrt{2\alpha}$ en 7.43, a partir del resultado se obtiene

$$\frac{\gamma \tilde{\alpha}}{\beta^2} = \frac{1}{4} \mathcal{W}_l \tag{7.45}$$

Reescribimos el cociente anterior en términos de los valores explícitos de $\tilde{\alpha},\ \gamma$ y $\beta;$ despejamos la energía E

$$E_{AHA,l} \equiv E = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{\mathcal{W}l}{l(l+1)} \tag{7.46}$$

Comparando la expresión anterior con la energía basal exacta del átomo de hidrógeno

$$\frac{E_{AHA,l}}{E_{0,l}} = \frac{(l+1)^2}{l(l+1)} \mathcal{W}_l \tag{7.47}$$

Tomando el límite cuando $l \to \infty$

$$\lim_{l \to \infty} \frac{E_{AHA,l}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^2}{l(l+1)} \mathcal{W}_l = 1$$
 (7.48)

obteniendo una derivación de la fórmula de Wallis a partir del comportamiento asintótico de la ecuación de Nikiforov Uvarov que describe al átomo de hidrógeno.

7.6. La fórmula de Wallis en el potencial de Pöschl-Teller

Para el caso del potencial Pösch-Teller en términos de la ecuación de Nikiforov-Uvarov, reescribimos la ecuación 6.15 a continuación,

$$R_{n_r l}''(s) + \frac{1 - 3s}{2s(1 - s)} R_{n_r l}'(s) + \frac{1}{4s^2(1 - s)^2} \left[-\delta s^2 + \left(\gamma + \delta - \varepsilon^2\right)s - \gamma\right] R_{n_r l}(s) = 0 \quad (7.49)$$

donde,

$$-\varepsilon^{2} = \frac{2\mu E}{\hbar^{2} \alpha^{2}}; \qquad \delta = \frac{2\mu V_{0}}{\hbar^{2} \alpha^{2}}; \qquad \gamma = \frac{1}{4}(k-1)(k-3); \qquad k = N+2l.$$
 (7.50)

Suponemos que el cambio de variable de la forma $s \to x$ es válido, entonces la ecuación anterior se reescribe como,

$$R_{n_r l}''(x) + \frac{1 - 3x}{2x(1 - x)} R_{n_r l}'(x) + \frac{1}{4x^2(1 - x)^2} \left[-\delta x^2 + \left(\gamma + \delta - \varepsilon^2\right)x - \gamma\right] R_{n_r l}(x) = 0 \quad (7.51)$$

Ahora podemos emplear la función prueba de la forma $R_{n_r,l}(x) = \chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$ para realizar un cálculo variacional. Considerando el comportamiento asintótico de la ecuación 7.51 cuando $x \to 0$ obtenemos,

$$\frac{1}{4x^2(1-x)^2} \left[-\delta x^2 + \left(\gamma + \delta - \varepsilon^2\right)x - \gamma \right] R_{n_r l}(x) = 0$$
 (7.52)

Para determinar el valor de expectación de la ecuación anterior, basta con calcular el valor esperado únicamente del númerador,

$$\frac{\langle A_{NU} \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \chi_{\alpha l}(x) | -\delta x^2 + (\gamma + \delta - \varepsilon^2) x - \gamma | \chi_{\alpha l}(x) \rangle}{\langle \chi_{\alpha l}(x) | \chi_{\alpha l}(x) \rangle}$$

$$= -\gamma - \sqrt{2\alpha} \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})} \left(\gamma + \delta - \varepsilon^2\right) - \frac{\delta}{(l+\frac{3}{2})} (2\alpha) = 0$$
(7.53)

El valor de α que da el "mínimo" en $\langle A_{NU} \rangle$ es,

$$\sqrt{2\alpha} = \frac{\left(\gamma + \delta - \varepsilon^2\right)}{-2\delta} \frac{\Gamma(l+2)(l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}$$
(7.54)

A partir del cual se obtiene el resultado

$$\frac{\gamma\delta}{\left(\gamma+\delta-\varepsilon^2\right)^2} = \frac{(l+1)^2}{4(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})}\right]^2 \tag{7.55}$$

Expresamos el cociente anterior en términos de los valores explícitos de ε , δ , γ y k=N+2l considerando el caso N=3 y despejando para la energía obtenemos:

$$E_{PT,l} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} \left[l(l+1) + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 \alpha^2} - 2\sqrt{\frac{2\mu V_0 l(l+1)}{\hbar^2 \alpha^2 \mathcal{W}_l}} \right]$$
(7.56)

A continuación calculamos el cociente entre $E_{PT,l}$ y el resultado ëxactodel potencial Pösch-Teller (ecuación 6.17) obtenida por el método de Nikiforov Uvarov,

$$\frac{E_{PT,l}}{E_{0,l}} = \frac{-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} \left[l(l+1) + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 \alpha^2} - 2\sqrt{\frac{2\mu V_0 l(l+1)}{\hbar^2 \alpha^2 W_l}} \right]}{-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\mu} \left[-2(l+\frac{3}{2}) + \sqrt{1 + \frac{8\mu V_0}{\hbar^2 \alpha^2}} \right]^2},$$
(7.57)

Tomando el límite

$$\lim_{l \to \infty} \frac{E_{PT,l}}{E_{0,l}} = 1 \tag{7.58}$$

sin embargo, no conduce a una fórmula tipo Wallis. No obstante, para el caso en el límite de aproximación parabólica para el potencial Pöschl-Teller obtenemos la raíz cuadrada del recíproco de la fórmula de Wallis.

7.6.1. Fórmula tipo Wallis del potencial Pöschl-Teller: aproximación cuadrática.

El potencial tipo Pöschl-Teller $V(r) = -\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha r)}$ definido en 6.11, puede mapearse al oscilador armónico para valores pequeños de β . Tomando en cuenta las identidades hiperbólica $\cosh^2(\beta r) = 1 + \sinh^2(\beta r)$ y $\sinh(\beta r) \approx \beta r$, el potencial tipo Pöschl-Teller se reescribe como el oscilador armónico,

$$V(r) = -\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha r)} = \frac{V_0}{1 + (\beta r)^2} \approx V_0 \left[1 - (\beta r)^2 \right]. \tag{7.59}$$

Por tanto, la ecuación de Schrödinger N-dimensional para el potencial tipo Pöschl-Teller se lee,

$$H_{OA}R_{\alpha l}(r) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N-1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) - V_0 + V_0(\beta r)^2 - E \right\} R_{\alpha l}(r) = 0$$
(7.60)

Ahora, si definimos una variable para la energía de la forma

$$E_H \equiv E + V_0 \tag{7.61}$$

La ecuación 7.60 se puede reescribir en términos E_H como,

$$H_{OA}R_{\alpha l}(r) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N-1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) + V_0(\beta r)^2 - E_H \right\} R_{\alpha l}(r) = 0 \quad (7.62)$$

Note que si definimos $V_0\beta^2=\omega$ el problema H_{OA} corresponde al oscilador armónico en dimensiones arbitratrias. A continuación, reescribimos esta ecuación cuando N=3 en la forma genérica de la ecuación de Nikiforov Uvarov.

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2x} \frac{d}{dx} + \frac{\left(-x^2 + \xi^2 x - l(l+1) \right)}{4x^2} \right] R_{\alpha l}(x) = 0$$
 (7.63)

donde $\xi^2 = \frac{2E}{\hbar\omega}$.

Consideramos el comportamiento asintótico de la ecuación 7.63 cuando $x \to 0$, obtenemos:

$$\frac{\left(-x^2 + \xi^2 x - l(l+1)\right)}{4x^2} R_{\alpha l}(x) = 0 \tag{7.64}$$

Nuevamente utilizamos la función prueba de la forma $R_{\alpha,l}(x) = \chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$, e identificamos en 7.64 los parámetros S, T y U de la función A_{NU} en la ecuación 7.35 y utilizando 7.39 tenemos

$$\frac{l(l+1)}{\xi^4} = \frac{(l+1)^2}{4(l+\frac{3}{2})} \left(\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})}\right)^2
= \frac{1}{4} \mathcal{W}_l$$
(7.65)

donde ξ es $\sqrt{\frac{2E}{\hbar\omega}}.$ Despejando la energía E de 7.65

$$E_{OA,l} \equiv E = \sqrt{\frac{l(l+1)}{W_l}} \hbar \omega \tag{7.66}$$

De nuevo definimos el cociente entre $E_{OA,l}$ y la energía basal exacta del oscilador armónico en 3 dimensiones $E_{0,l}=(l+\frac{3}{2})\hbar\omega$:

$$\frac{E_{OA,l}}{E_{0,l}} = \frac{1}{\sqrt{W_l}} \frac{\sqrt{l(l+1)}}{l + \frac{3}{2}}$$
 (7.67)

Considerando el límite cuando $l \to \infty$ en la expresión anterior:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{E_{OA,l}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{1}{\sqrt{W_l}} = 1 \tag{7.68}$$

Obteniendo la raíz cuadrada del recíproco de la fórmula de Wallis.

$$\lim_{l \to \infty} \prod_{j=1}^{l+1} \frac{(2j-1)\sqrt{2j+1}}{2j} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$
 (7.69)

Es importante mencionar que Chaschina y Silagadze realizaron un cálculo variacional para determinar el espectro energético del oscilador armónico en 3 dimensiones utilizando la función prueba $R_{\alpha l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2}$, reproduciendo los valores exactos del oscilador armónico $E_{o,l} = \hbar \omega \left(l + \frac{3}{2}\right)$ [23]. No obstante, no obtienen una derivación de la fómrula de Wallis. Por otro lado, considerando el comportamiento asintótico de la ecuación de Nikiforov Uvarov que modela el oscilador armónico en 3 dimensiones, utilizando la función prueba $\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)} e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$ se obtiene una derivación de la raíz cuadrada del recíproco de la fórmula de Wallis.

Finalmente, en el Apéndice D, se demuestran dos derivaciones diferentes de fórmulas tipo Wallis a partir de los resultados obtenidos por el método variacional y la función prueba $R_{\alpha l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ aplicado al problema del hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones arbitrarias. En la sección D.0.3 de este apéndice se comenta la relación entre la fórmula de Wallis para π y la definción del número de Euler. De forma sorprendente, la conexión entre las dos contantes matemáticas se da a partir del cociente W_l .

Tabla 7.1: Espectro energético de diferentes problemas de campo central obtenido mediante el método de Rayleigh-Ritz

Potencial	Función Prueba	Energía Basal (Exacta)	Energía Basal (Variacional)	Fórmulas tipo Wallis
Átomo de Hidrógeno	$R_{\alpha l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2}$	4	$\left\langle H_{FH}\right\rangle _{min}^{l}=-\frac{\mu e^{4}}{2\hbar^{2}}\frac{1}{(l+\frac{3}{2})}\left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})}\right]^{2}$	
$U(r) = -\frac{e^2}{r}$	$R_{\alpha l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$	$E_{0,l} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \frac{1}{(l+1)^2}$	$\langle H_{CS}\rangle_{min}^l = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{l+\frac{1}{2}}{l+1} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^4$	$\frac{\pi}{2}, \frac{\pi^2}{4}$
Quark-Antiquark Lineal $U(r) = -rac{b}{r} + a r$	$\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$	$E_{N(n,l)} = \frac{3a}{\delta} - \frac{2\mu(b + \frac{3a}{\delta})^2}{\{(2n+1) \pm \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8\mu a}{\delta^3}}\}^2}$	$\langle H_T \rangle_{min}^l = \frac{[(b + \frac{3a}{\delta^2}) \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}]^2}{2\Omega_l} + \frac{3a}{\delta}$	$\frac{\pi}{2}$
Quark-Antiquark cuadrático $U(r) = -\frac{b}{r} + c^2 r$	$\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)} e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$	$E_{N2(n,l)} = \frac{6b}{\delta^2} - \frac{2\mu(c + \frac{8b}{\delta^3})}{[2n + 1 \pm \sqrt{1 + 4l(l + 1) + \frac{24\mu b}{\delta^4}}]^2}$	$\left< H_{T2} \right>_{min}^{l} = \frac{[(\frac{6a}{\delta^2})\frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+\frac{5}{2})}]^2}{2\Omega_l} + \frac{b}{x^2}$	$\frac{\pi}{2}$
Pösch-Teller $V(r) = -\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha r)}$	$\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$	$E_{n_T,l} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\mu} \left[-2(2n_T + l + \frac{D}{2}) + \sqrt{1 + \frac{8\mu V_0}{\hbar^2 \alpha^2}} \right]$	$E_{PT,l} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} \left[l(l+1) + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 \alpha^2} - 2\sqrt{\frac{2\mu V_0 l(l+1)}{\hbar^2 \alpha^2 W_l}} \right]$	$\frac{\pi}{2}$
Oscilador armónico $U(r)=\omega r^2$	$\chi_{\alpha l}(x) = x^{-(l+1)}e^{-\frac{\alpha}{x^2}}$	$E_{o,l}=\hbar\omega \biggl(l+\frac{3}{2}\biggr)$	$E_{OA,l} = \sqrt{\frac{l(l+1)}{\mathcal{W}_l}}\hbar\omega$	$\sqrt{\frac{2}{\pi}}$
Átomo de Hidrógeno N-dimensional	$R_{\alpha l}(r) = r^l e^{-\alpha r^2}$	$\sim N = \mu e^4 = 1$	$\langle H_N \rangle_{min}^l = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \big[\frac{\Gamma(l+\frac{N-1}{2})}{\Gamma(l+\frac{N}{2})}\big]^2 \frac{1}{l+\frac{N}{2}}$	$\frac{\pi}{2}$
$U(r) = -\frac{e^2}{r}$	$R_{\alpha l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$	$E_{0,l}^{N} = -\frac{\mu e^{4}}{2\hbar} \frac{1}{(l + \frac{N-1}{2})^{2}}$	$\langle H_{AHN2} \rangle_{min}^l = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{(l\!+\!\frac{3}{2})}{(l\!+\!\frac{N}{2})(l\!+\!2-\frac{N}{2})(l\!+\!1)(l\!+\!\frac{N}{2}\!-\!1)^2}$	$\frac{\pi}{2}, \frac{\pi^2}{4}$
			$\times \left\{ \frac{\Gamma(l+\frac{N-1}{2})\Gamma(l+\frac{5-N}{2})}{\Gamma(l+\frac{N}{2}-1)\Gamma(l+2-\frac{N}{2})} \right\}^2$	$\frac{2}{\pi}$, $\frac{4}{\pi^2}$

Capítulo 8

Conclusiones

Se determinó el espectro energético para distintos problemas de campo central dentro del esquema de cálculo de variaciones, específicamente para átomo de hidrógeno, quarkantiquark con confinamiento lineal, quark-antiquark con confinamiento cuadrático y potenciales Pöschl-Teller. Demostramos que para potenciales radiales de la forma genérica $V(r) = \sum_{\mu=-2}^2 a_\mu r^\mu$ con a_μ coeficientes constantes usados en física de altas energías y teoría de campos, se puede definir un cociente de exactitud entre el espectro energético obtenido mediante el cálculo variacional con el valor exacto. Este cociente resulta ser función del parámetro $\mathcal{W}_l \equiv \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})}\right]^2$ donde l es el número cuántico angular y que en el límite cuando $l \to \infty$ conduce a expresiones tipo Wallis para $\frac{\pi}{2}, \frac{2}{\pi}, \frac{4}{\pi^2}$ y $\sqrt{\frac{2}{\pi}}$.

Bibliografía

- [1] C. Meyers, "New derivation of pi links quantum physics and pure math," *American Institute of Physics*, 2015.
- [2] S.-J. Tu and E. Fischbach, "A study on the randomness of the digits of π ," International Journal of Modern Physics C, vol. 16, no. 02, pp. 281–294, 2005.
- [3] Exploratorium, "A brief history of π ," 2010.
- [4] T. Heath, The Work of Archimedes. 2008.
- [5] P. Eymard and J. P. Lafon, The Number $\setminus pi$. American Mathematical Soc., 2004.
- [6] J. Wallis, The Arithmetic of Infinitesimals. 2000.
- [7] R. Flood, R. Wilson, and P. Beeley, John Wallis.
- [8] G. E. Andrews, R. Askey, and R. Roy, *Special functions*, vol. 71. Cambridge university press, 1999.
- [9] T. Friedmann and C. Hagen, "Quantum mechanical derivation of the wallis formula for π ," Journal of Mathematical Physics, vol. 56, no. 11, p. 112101, 2015.
- [10] P. R. Berman, Introductory Quantum Mechanics: A traditional Approach Emphasizing Connections with Classical Physics. Springer International Publishing, 2018.
- [11] S. Gasiorowicz, Quantum physics. John Wiley & Sons, 2007.
- [12] Z. Nouredine, Quantum Mechanics. Concepts and Applications. Wiley, 2009.

BIBLIOGRAFÍA 58

[13] V. Stephanovich, E. Y. Sherman, N. Zinner, and O. Marchukov, "Energy-level repulsion by spin-orbit coupling in two-dimensional rydberg excitons," *Physical Review B*, vol. 97, no. 20, p. 205407, 2018.

- [14] C. Quigg and J. L. Rosner, "Quantum mechanics with applications to quarkonium," *Physics Reports*, vol. 56, no. 4, pp. 167–235, 1979.
- [15] S. Hassani, Mathematical Physics. A modern Introduction to Its Foundations. Springer International Publishing Switzerland, 1999.
- [16] M. Walker, Mathematical Methods of Physics. Addison-Wesley Publishing Company, 1970.
- [17] R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics. Springer+Business Media, 1980.
- [18] C. Berkdemir, Theorical Concepts of Quantum Mechanics. 2012.
- [19] A. Muleshkov and T. Nguyen, "Easy proof of the jacobian for the n-dimensional polar coordinates," *Pi Mu Epsilon Journal*, vol. 14, pp. 269–273, 2016.
- [20] K. D. Granzow, "N-dimensional total orbital angular-momentum operator," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 4, no. 7, pp. 897–900, 1963.
- [21] M. M. Nieto, "Hydrogen atom and relativistic pi-mesic atom in n-space dimensions," American Journal of Physics, vol. 47, no. 12, pp. 1067–1072, 1979.
- [22] F. J. Asturias and S. R. Aragón, "The hydrogenic atom and the periodic table of the elements in two spatial dimensions," *American Journal of Physics*, vol. 53, no. 9, pp. 893–899, 1985.
- [23] O. Chashchina and Z. Silagadze, "On the quantum mechanical derivation of the wallis formula for π ," *Physics Letters A*, vol. 381, no. 32, pp. 2593–2597, 2017.
- [24] I. Cortese and J. A. García, "Wallis formula from the harmonic oscillator," Journal of Geometry and Physics, vol. 124, pp. 249–254, 2018.
- [25] T. Padmanabhan, Sleeping Beauties in Theoretical Physics. Springer, 2015.

BIBLIOGRAFÍA 59

[26] F. Cornish, "The hydrogen atom and the four-dimensional harmonic oscillator," *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 17, no. 2, p. 323, 1984.

- [27] B. Povh, K. Rith, C. Scholz, and F. Zetsche, "Particles and nuclei," An Introduction to the Physical Concepts, Berlin and Heidelberg: Springer-Verlag (Italian Translation:(1998), Particelle e nuclei. Un'introduzione ai concetti sici, Torino: Bollati Boringhieri editore), 1995.
- [28] S. Kuchin and N. Maksimenko, "Theoretical estimations of the spin-averaged mass spectra of heavy quarkonia and bc mesons," *Universal Journal of Physics and Appli*cation, vol. 7, p. 295, 2013.
- [29] A. Al-Jamel and H. Widyan, "Heavy quarkonium mass spectra in a coulomb field plus quadratic potential using nikiforov-uvarov method," Applied Physics Research, vol. 4, no. 3, p. 94, 2012.
- [30] R. Faustov, V. Galkin, A. Tatarintsev, and A. Vshivtsev, "Spectral problem of the radial schrödinger equation with confining power potentials," *Theoretical and mathe*matical physics, vol. 113, no. 3, pp. 1530–1542, 1997.
- [31] R. Kumar and F. Chand, "Series solutions to the n-dimensional radial schrödinger equation for the quark-antiquark interaction potential," *Physica Scripta*, vol. 85, no. 5, p. 055008, 2012.
- [32] J. Beringer, J. Arguin, R. Barnett, K. Copic, O. Dahl, D. Groom, C. Lin, J. Lys, H. Murayama, C. Wohl, et al., "Review of particle physics," Physical Review D-Particles, Fields, Gravitation and Cosmology, vol. 86, no. 1, p. 010001, 2012.
- [33] D. Agboola, "Solutions to the modified pöschl-teller potential in d-dimensions," *Chinese Physics Letters*, vol. 27, no. 4, p. 040301, 2010.
- [34] A. Sanayei, "From e to π : Derivation of the wallis formula for π from e," arXiv preprint arXiv:1606.07460, 2016.

Apéndice A

Solución del Átomo de Hidrógeno

El átomo de hidrógeno es un sistema conformado por dos partículas, un protón y un electrón, cuyo hamiltoniano es:

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_p} \nabla_p^2 - \frac{1}{m_e} \nabla_e^2\right) + V(r)\right) \tag{A.1}$$

 \hbar es la constante de Planck reducida, m la masa y ∇^2 el laplaciano del sistema, donde los subíndices p y e corresponden al protón y electrón respectivamente. V(r) es el potencial de interacción entre ambas partículas de la forma:

$$V(r) = -\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|} \tag{A.2}$$

donde $|\vec{r}_e - \vec{r}_p| = \vec{r}$ es la distancia de separación entre el electrón y el protón. Ya que el potencial depende de las coordenadas relativas $\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$ es apropiado utilizar dicho sistema de referencia así como las coordenadas de centro de masa $\vec{R} = X\vec{i} + Y\vec{j} + Z\vec{k}$. Se consideran las relaciones:

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r_e} + m_p \vec{r_p}}{m_e + m_p}, \qquad \vec{r} = \vec{r_e} - \vec{r_p}$$
(A.3)

La transformación de coordenadas \overrightarrow{r}_e y \overrightarrow{r}_p al sistema \overrightarrow{R} y \overrightarrow{r} se indica por la relación:

$$\frac{1}{m_e} \nabla_e^2 + \frac{1}{m_p} \nabla_p^2 = \frac{1}{M} \nabla_R^2 + \frac{1}{\mu} \nabla_r^2$$
 (A.4)

donde $M = m_e + m_p$ y $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$. Al sustituir la ecuación A.4 en el Hamiltoniano A.1, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{M}\nabla_R^2 + \frac{1}{\mu}\nabla_r^2\right) + V(r)\right)\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{r})$$
(A.5)

Ya que \overrightarrow{R} y \overrightarrow{r} son vectores independientes, la función Ψ en la expresión anterior es el producto de dos funciones:

$$\Psi = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r}) \tag{A.6}$$

donde $\Phi(\vec{R})$ y $\psi(\vec{r})$ dependen de los sistemas coordenados de centro de masa y relativo respectivamente. Al sustituir el producto $\Psi = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$ en la ecuación A.5, se obtienen 2 ecuaciones independientes de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Phi(\vec{R}) = E_R\Phi(\vec{R}) \tag{A.7}$$

 \mathbf{S}

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r})$$
(A.8)

La primera ecuación, dependiente de \overrightarrow{R} , corresponde al comportamiento de una partícula libre. La segunda expresión, dependienten de \overrightarrow{r} , involucra un potencial de interacción y es la ecuación que, coloquialmente, se denomina la ecuación del átomo de hidrógeno. Esta segunda ecuación es un problema de campo central que por conveniencia se reescribe en coordenadas esféricas:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{e^2}{r} \right] \psi(r) = E_r \psi \quad (A.9)$$

Como se menciona en el texto principal mediante el método de separación de variables un problema de campo central se reescribe en términos de una ecuación angular y una ecuación radial:

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} Y(\theta, \phi) + \frac{1}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \phi) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi) = -l(l+1)Y(\theta, \phi) \tag{A.10}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r) + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}R(r) + V(r)R(r) - ER(r) = \frac{l(l+1)}{r^2}R(r)$$
(A.11)

donde la solución para la parte angular se expresa en términos de los esféricos armónicos $Y_l^m(\theta,\phi)$:

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \times \begin{cases} (-1)^m & \text{si } m \ge 0\\ 1 & \text{si } m < 0 \end{cases}$$
(A.12)

donde $P_l^m(\cos \theta)$ son los polinomios asociados de Legendre. Por otra parte, a partir del comportamiento asintótico de la ecuación radial reducida, la función U(r) es:

$$U(r) = r^{l+1} f(r) e^{\frac{\sqrt{2\mu(-E)}}{\hbar}r}$$
(A.13)

donde U(r) = rR(r) y $f(r) = \sum_{k=0}^{N} b_k r^k$, la función radial resultante es un polinomio definido en términos de los polinomios asociados de Laguerre $L_k^N(r) = \frac{d^N}{dr^N} e^r \frac{d}{dr^k} (r^k e^{-r})$:

$$R(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right)}$$
(A.14)

Ya que la función de onda ψ es el producto de una función radial R(r) y una ecuación angular $Y_l^m(\theta,\phi)$, su expresión genérica es:

$$\psi = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right) (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_{l,m}(\cos\theta) e^{im\phi}$$
(A.15)

A partir de estas funciones de onda, se determina la expresión analítica de la energía del átomo de hidrógeno

$$E_{n_r,l} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar} \frac{1}{(n_r + l + 1)^2}$$
 (A.16)

Apéndice B

Método de Nikiforov-Uvarov

El método de Nikiforov Uvarov consiste en resolver la ecuación diferencial lineal de segundo orden:

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\psi(s) = 0$$
(B.1)

donde $\sigma(s)$ y $\tilde{\sigma}(s)$ son polinomios de máximo segundo orden, $\tilde{\tau}(s)$ un polinomio de máximo primer orden y $\psi(s)$ es una función de tipo hipergeométrica.

Para ciertos potenciales, la ecuación de Schrödinger para problemas de campo central puede reescribirse en térimnos de la ecuación B.1 a través de una transformación $r \to s$. A continuación se describeel método para determinar la solución analítica del método de Nikiforov-Uvarov:

Sea $\psi(s)$ el producto de dos funciones $\phi(s)y(s)$, a partir de las cuales la ecuación B.1 se reduce a la forma:

$$y''(s) + \left(2\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)}\right)y'(s) + \left(\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} + \frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}\right)y(s) = 0$$
 (B.2)

De la ecuación anterior, sea el coeficiente de y'(s) la razón entre dos polinómios $\tau(s)/\sigma(s)$:

$$2\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} = \frac{\tau(s)}{\sigma(s)}$$
(B.3)

donde $\tau(s)$ es un polinomio de máximo primer orden. Se reescribe el primer término de la derecha:

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \tag{B.4}$$

donde $\pi(s)$ es un polinómio de máximo primer orden:

$$\pi(s) = \frac{1}{2} [\tau(s) - \tilde{\tau}(s)] \qquad \to \qquad \tau(s) = \tilde{\tau(s)} + 2\pi(s) \tag{B.5}$$

A partir de la ecuación B.4 obtenemos la identidad:

$$\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} = \left(\frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\right)' + \left(\frac{\phi'(s)}{\phi(s)}\right)^2 = \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)}\right)' + \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)}\right)^2 \tag{B.6}$$

donde $\phi''(s)/\phi(s)$ es un coeficiente de y(s).

De forma similar, sea el coeficiente de y(s) una razón entre dos polinomios $\bar{\sigma}(s)/\sigma^2(s)$ de la forma:

$$\frac{\phi''(s)}{\phi(s)} + \frac{\phi'(s)}{\phi(s)} \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} = \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}$$
(B.7)

donde:

$$\bar{\sigma}(s) = \tilde{\sigma}(s) + \pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \pi'(s)\sigma(s)$$
(B.8)

Sustituyendo las ecuaciones B.6 y B.7 se reescribe la ecuación B.2 de forma simplificada:

$$y''(s) + \frac{\tau(s)}{\sigma(s)}y'(s) + \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}y(s) = 0$$
(B.9)

Se propone que el polinomio $\sigma(s)$ es un divisor de $\bar{\sigma}(s)$, de modo que cumple con la expresión:

$$\bar{\sigma}(s) = \lambda \sigma(s)$$
 (B.10)

donde λ es una constante, por lo tanto la ecuación B.9 se reescribe como:

$$\sigma(s)y''(s) + \tau(s)y'(s) + \lambda y(s) = 0$$
(B.11)

Adicionalmente, al utilizar la proposición $\bar{\sigma}(s) = \lambda \sigma(s)$ en la ecuación B.8 se obtiene un polinomio de segundo grado en términos del polinomio $\pi(s)$:

$$\pi^{2}(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \tilde{\sigma}(s) - k\sigma(s) = 0$$
(B.12)

donde:

$$k = \lambda - \pi'(s) \tag{B.13}$$

Las raíces de este polinomío están dadas por la expresión:

$$\pi(s) = \frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)}$$
(B.14)

Se definió que $\pi(s)$ es un polinomio de máximo primer orden y para conocer su valor explícito es necesario determinar el valor de k. Para ello se reescribe el discriminante como un polinomio de segundo orden respecto a la variable k. De la expresión anterior, el discriminante se igual a cero y en consecuencia se obtienen dos valores explícitos de k. Estos valores se sustituyen en la ecuación B.14 y se determinan 4 valores del polinomio $\pi(s)$. En este punto se determina que valor de $\pi(s)$ tiene un significado físico aceptable: con el resultado anterior, se determina $\tau(s)$ y λ de las ecuaciones B.5 y B.13 respectivamente.

Para determinar el valor de y(s) se procede de la siguiente manera. Se deriva la ecuación B.9 y se utiliza la notación: $v_1(s) = y'(s)$

$$\sigma(s)v_1''(s) + \tau_1(s)v_1'(s) + \mu_1 v_1(s) = 0$$
(B.15)

donde $\tau_1(s) = \tau(s) + \sigma'(s)$ y $\mu_1 = \lambda + \tau'(s)$. De ambas expresiones se observa que $\tau_1(s)$ es un polinomio máximo de primer orden y μ_1 es una constante independiente de la variabel s.

La segunda derivada de la ecuación B.9, con la notación $v_2(s) = y''(s)$, es:

$$\sigma(s)v_2''(s) + \tau_2(s)v_2'(s) + \mu_2 v_2(s) = 0$$
(B.16)

donde $\tau_2(s) = \tau_1(s) + \sigma'(s) = \tau(s) + 2\sigma'(s)$ y $\mu_2 = \mu_1 + \tau'_1(s) = \lambda + 2\tau'(s) + \sigma''(s)$. De forma similar, la n-ésima derivada de la ecuación 6.26 donde $v_n(s) = y(s)$ es:

$$\sigma(s)v_n''(s) + \tau_n(s)v_n'(s) + \mu_n v_n(s) = 0$$
(B.17)

donde las reglas de recurrencia para $\tau_n(s)$ y μ_n son:

$$\tau_n(s) = \tau(s) + n\sigma'(s) \tag{B.18}$$

$$\mu_n = \lambda + n\tau'(s) + \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s)$$
(B.19)

en el caso donde $\mu_n = 0$, la ecuación anterior se reescribe como:

$$\lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s) \qquad (n = 0, 1, 2, ...)$$
 (B.20)

y en consecuencia la solución y(s) es un polinomio de orden n, dado por la fórmula de Rodrígues:

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)]$$
 (B.21)

donde B_n es una constante de normalización y la función ρ debe satisfacer la condición:

$$(\sigma(s)\rho(s))' = \tau(s)\rho(s)$$
 (B.22)

Con este conjunto de suposiciones y procedimientos, el método de Nikiforov-Uvarov logra reproducir las energías exactas de distintos problemas de campo central.

B.1. Átomo de hidrógeno por el método de NU

La ecuación del átomo de hidrógeno es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - \frac{e^2}{r}\right)R_{\alpha l}(r) = ER_{\alpha l}(r)$$
 (B.23)

Se reescribe en términos de la ecuación B.1 donde $R(r) \equiv \psi(s)$ y donde la transformación $r \to s$ es válida:

$$\frac{d^2}{ds^2}\psi(s) + \frac{2}{s}\frac{d}{ds}\psi(s) + \frac{1}{s^2}[-\alpha s^2 + \beta s - \gamma]\psi(s) = 0$$
(B.24)

donde $\alpha = -2E\mu/\hbar^2$, $\beta = 2\mu e^2/\hbar^2$ y $\gamma = l(l+1)$. Se limita el problema a la energía de los estados ligados, de forma que el parámetro α es positivo. De acuerdo a la ecuación anterior:

$$\tilde{\tau} = 2, \qquad \sigma(s) = s, \qquad \tilde{\sigma}(s) = -\alpha s^2 + \beta s - \gamma$$
 (B.25)

Se sustituyen los polinomios $\tilde{\tau}$, $\sigma(s)$ y $\tilde{\sigma}(s)$ en la ecuación de Nikiforov-Uvarov. A partir del procedimiento descrito en el Apéndice B, se llega a la expresión para el polinomio $\pi(s)$

$$\pi(s) = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{4\alpha s^2 + (k - \beta)s + 1 + 4\gamma}$$
 (B.26)

Se reescribe el discriminante anterior de la forma $\Delta = b^2 - 4ac$ y se iguala a cero para conocer el valor de k.

$$\Delta = 16(k - \beta)^2 - 16\alpha(1 + 4\gamma) = 0$$

$$= k^2 - 2k\beta + \beta^2 - \alpha(1 + 4\gamma) = 0$$

$$\to k_{\pm} = \beta \pm \sqrt{\alpha(1 + 4\gamma)}$$
(B.27)

Se sustituye el valor de k en B.26:

$$\pi(s) = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \begin{cases} (2\sqrt{\alpha}s + \sqrt{1+4\gamma}), & \text{para } k_{+} = \beta + \sqrt{\alpha(1+4\gamma)} \\ (2\sqrt{\alpha}s - \sqrt{1+4\gamma}) & \text{para } k_{-} = \beta - \sqrt{\alpha(1+4\gamma)} \end{cases}$$
(B.28)

De las cuatro expresiones del polinomio $\pi(s)$ se selecciona una para determinar $\tau(s)$ y λ de forma que cumplan con la ecuación B.19 donde $\mu_n=0$ para cierto n. Esta condición

se cumple si $\tau' < 0$, en consecuencia se opta por el valor de $\pi(s)$:

$$\pi(s) = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(2\sqrt{\alpha s} - \sqrt{1 + 4\gamma} \right)$$
 (B.29)

donde $\tau(s)$ y su derivada son respectivamente:

$$\tau(s) = 1 + \sqrt{1 + 4\gamma} - 2\sqrt{\alpha}s \tag{B.30}$$

$$\tau'(s) = -2\sqrt{\alpha} \tag{B.31}$$

De estas expresiones, se determinan los valores de las constantes λ y λ_n , obteniendo:

$$\lambda = \beta - \sqrt{\alpha(1+4\gamma)} - \sqrt{\alpha} \tag{B.32}$$

$$\lambda_n = 2n\sqrt{\alpha} \tag{B.33}$$

Cuando se comparan estás expresiones, se obtiene el espectro de energías del átomo de hidrógeno:

$$\beta - \sqrt{\alpha(1+4\gamma)} - \sqrt{\alpha} = 2n\sqrt{\alpha} \tag{B.34}$$

$$\alpha = \frac{\beta^2}{(1 + 2n + \sqrt{1 + 4\gamma})^2}$$
 (B.35)

$$-\frac{2\mu E}{\hbar^2} = \frac{(\frac{2\mu e^2}{\hbar^2})^2}{(1+2n+\sqrt{1+4\gamma})^2}$$
 (B.36)

$$E = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 (n+l+1)^2}$$
 (B.37)

La expresión resultante corresponde a las energías exactas de estados ligados del átomo de hidrógeno, donde se observa la condición de cuantización de la energía.

Apéndice C

Fórmula de Stirling para e y límite de la razón de exactitud W_l

La fórmula asintótica de Stirling está dada por la expresión:

$$\lim_{n \to \infty} \Gamma(n+1) = \sqrt{2\pi} n^{n+\frac{1}{2}} e^{-n}$$
 (C.1)

De la expresión anterior se deducen las siguientes expresiones:

$$\lim_{l \to \infty} \Gamma(l+1) = \sqrt{2\pi}(l)^{l+\frac{1}{2}} e^{-l}$$
 (C.2)

$$\lim_{l \to \infty} \Gamma(l + \frac{3}{2}) = \sqrt{2\pi} (l + \frac{1}{2})^{l+1} e^{-(l + \frac{1}{2})}$$
 (C.3)

$$\lim_{l \to \infty} \Gamma(l + \frac{1}{2}) = \sqrt{2\pi} (l - \frac{1}{2})^l e^{-(l - \frac{1}{2})}$$
 (C.4)

De las ecuaciones C.2 y C.3, se obtiene la razón:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} = \frac{\lim_{l \to \infty} \Gamma(l+1)}{\lim_{l \to \infty} \Gamma(l+\frac{3}{2})}$$

$$= \frac{\sqrt{2\pi}(l)^{l+\frac{1}{2}}e^{-l}}{\sqrt{2\pi}(l+\frac{1}{2})^{l+1}e^{-(l+\frac{1}{2})}}$$

$$= \frac{(l)^{l+\frac{1}{2}}e^{-l}}{(l+\frac{1}{2})^{l+1}e^{-(l+\frac{1}{2})}}$$
(C.5)

De forma similar la razón entre las ecuaciones C.2 y C.4 es:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{1}{2})} = \frac{\lim_{l \to \infty} \Gamma(l+1)}{\lim_{l \to \infty} \Gamma(l+\frac{1}{2})}$$

$$= \frac{\sqrt{2\pi}(l)^{l+\frac{1}{2}}e^{-l}}{\sqrt{2\pi}(l-\frac{1}{2})^{l}e^{-(l-\frac{1}{2})}}$$

$$= \frac{(l)^{l+\frac{1}{2}}e^{-l}}{(l-\frac{1}{2})^{l}e^{-(l-\frac{1}{2})}}$$
(C.6)

Como l es un número mucho mayor a cero tenemos que $l\pm\frac{1}{2}\approx l$ y $l+1\approx l$, en consecuencia tenemos que la razón anterior se aproxima a la unidad:

$$\frac{l^l e^{-l}}{l^l e^{-l}} = 1 \tag{C.7}$$

Al sustituir las expresiones anteriores en el cociente $W_l = \frac{(l+1)^2}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})}\right]^2$ y evaluando el

APÉNDICE C. FÓRMULA DE STIRLING PARA E Y LÍMITE DE LA RAZÓN DE EXACTITUD \mathcal{W}_L 71

límite cuando $l \to \infty$:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^{2}}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^{2}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^{2}}{(l+\frac{3}{2})^{2}} \cdot \lim_{l \to \infty} \frac{[\Gamma(l+1)]^{2}}{\Gamma(l+\frac{3}{2})\Gamma(l+\frac{1}{2})}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^{2}}{(l+\frac{3}{2})^{2}} \cdot \lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \cdot \lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{1}{2})} = 1$$
(C.8)

Demostrando que el límite lím $_{l\rightarrow\infty}\,\mathcal{W}_l$ tiende a la unidad.

Apéndice D

Fórmulas tipo Wallis y el número de Euler

En el presente apéndice, se demuestran dos derivaciones diferentes de fórmulas tipo Wallis a partir de los resultados obtenidos por el método variacional y la función prueba $R_{\alpha l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ aplicado al problema del hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones arbitrarias. Además, se comenta la relación entre la fórmula de Wallis para π y la definción del número de Euler a partir del cociente W_l .

Se parte del problema hipotético del átomo de hidrógeno N-dimensional, cuyo hamiltoniano está descrito por H_{AHN} (ecuación 5.6), se realiza un cálculo variacional con la función prueba $\Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ donde $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2+r^2)^{l+1}}$. El valor de expectación bajo estas consideraciones está dado por la expresión:

$$\frac{\langle \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi) | H_{AHN} | \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi) \rangle}{\langle \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi) | \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi) \rangle} = \frac{h^2}{2\mu} \frac{1}{\alpha^2} \frac{(l + \frac{N}{2})(l + 2 - \frac{N}{2})(l + 1)}{(l + \frac{3}{2})}$$

$$- \frac{e^2}{\alpha} \frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})\Gamma(l + \frac{5-N}{2})}{(l + \frac{N}{2} - 1)\Gamma(l + \frac{N}{2} - 1)\Gamma(l + 2 - \frac{N}{2})}$$
(D.1)

Para el caso cuando N=3 en la expresión anterior, se recupera el cálculo del átomo

de hidrógeno en 3 dimensiones con solución dado por la ecuación 5.2:

$$\frac{\langle \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)|H_{AH}|\Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)\rangle}{\langle \Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)|\Psi_{\alpha l}(r,\theta,\phi)\rangle} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(l+1\right) \left(l+\frac{1}{2}\right) \frac{1}{\alpha^2} - \frac{e^2}{\alpha} \frac{1}{(l+\frac{1}{2})} \left\lceil \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{1}{2})} \right\rceil^2 \quad (D.2)$$

Donde H_{AH} es el hamiltoniano del átomo de hidrógeno en 3 coordenadas espaciales. El mínimo de energía en D.1 respecto al parámetro α está dada por:

$$\langle H_{AHN2} \rangle_{min}^{l} = -\frac{\mu e^{4}}{2\hbar^{2}} \frac{(l + \frac{3}{2})}{(l + \frac{N}{2})(l + 2 - \frac{N}{2})(l + 1)(l + \frac{N}{2} - 1)^{2}}$$

$$\times \left\{ \frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})\Gamma(l + \frac{5-N}{2})}{\Gamma(l + \frac{N}{2} - 1)\Gamma(l + 2 - \frac{N}{2})} \right\}^{2}$$
(D.3)

Se establece un cociente entre H_{AHN2} y la expresión exacta $E_{0,l}=-\frac{\mu e^4}{2\hbar}\frac{1}{(l+1)^2}$, obteniendo:

$$\frac{\langle H_{AHN2} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \frac{(l + \frac{3}{2})(l + \frac{N-1}{2})^{2}}{(l + \frac{N}{2})(l + 2 - \frac{N}{2})(l + 1)(l + \frac{N}{2} - 1)^{2}} \left\{ \frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})\Gamma(l + \frac{5-N}{2})}{\Gamma(l + \frac{N}{2} - 1)\Gamma(l + 2 - \frac{N}{2})} \right\}^{2}$$
(D.4)

como se detallará más adelante, el cociente tiende a la unidad cuando se considera el límite $l \to \infty$, por lo que:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{AHN2} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{(l + \frac{3}{2})(l + \frac{N-1}{2})^{2}}{(l + \frac{N}{2})(l + 2 - \frac{N}{2})(l + 1)(l + \frac{N}{2} - 1)^{2}}$$

$$\times \left\{ \frac{\Gamma(l + \frac{N-1}{2})\Gamma(l + \frac{5-N}{2})}{\Gamma(l + \frac{N}{2} - 1)\Gamma(l + 2 - \frac{N}{2})} \right\}^{2} = 1$$
(D.5)

A continuación, de la razón anterior, se analizan los casos de dimensiones pares e

impares *i.e.*, cuando N=2k+1 y N=2k donde k es un número entero positivo. Esto con la intención de obtener, similar a Friedman y Hagen, una derivación para la fórmula de Wallis en el problema hipotético del átomo de hidrógeno en N-dimensiones arbitrarias utilizando la función de onda $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$. Se demostrará que tanto para N impar como par en el límite anterior, el cociente anterior tiende a la unidad y es proporcional a la razón \mathcal{W}_l .

D.0.1. Dimensiones pares

Para el caso de dimensiones pares donde N=2k en D.1, problema hipotético del átomo de hidrógeno, H_{AN} . El cociente D.4 se escribe como:

$$\frac{\langle H_{AH2k} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \frac{\{\Gamma(l+k-\frac{1}{2})\Gamma(l+\frac{5}{2}-k)\}^{2}(l+\frac{3}{2})(l+k-\frac{1}{2})^{2}}{(l+k)(l-k+2)(l+1)(l+k-1)^{2}\{\Gamma(l+k-1)\Gamma(l-k+2)\}^{2}}$$
(D.6)

Se introducen las variables l+k=l'+1 y l-k=l'', la ecuación anterior se reescribe en términos de cocientes de funciones Γ :

$$\frac{\langle H_{AH2k} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \frac{\Gamma(l' + \frac{1}{2})\Gamma(l' + \frac{3}{2})}{\Gamma(l' + 1)\Gamma(l' + 1)} \cdot \frac{\Gamma(l'' + \frac{1}{2})\Gamma(l'' + \frac{3}{2})}{\Gamma(l'' + 1)\Gamma(l'' + 1)} \cdot \frac{(l' + \frac{1}{2})}{(l' + 1)} \cdot \frac{(l'' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{1}{2})}{(l'' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{3}{2})}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + 2)}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + 2)}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + 2)}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + 2)}{(l' + 1)^{2}(l'' + 2)}$$

Cuando se considera el límite $l \to \infty$, la razón anterior puede escribirse en términos del cociente W_l :

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{AH2k} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l' + \frac{1}{2})\Gamma(l' + \frac{3}{2})}{\Gamma(l' + 1)\Gamma(l' + 1)} \cdot \frac{\Gamma(l'' + \frac{1}{2})\Gamma(l'' + \frac{3}{2})}{\Gamma(l'' + 1)\Gamma(l'' + 1)}$$

$$\lim_{l \to \infty} \frac{(l' + \frac{1}{2})}{(l' + 1)} \cdot \frac{(l'' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{1}{2})}{(l'' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l + \frac{3}{2})}{(l + 1)}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{1}{W_{l'}} \frac{(l' + 1)^{2}}{(l' + \frac{3}{2})^{2}} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \frac{1}{W_{l''}} \frac{(l'' + 1)^{2}}{(l'' + \frac{3}{2})^{2}}$$

$$\lim_{l \to \infty} \frac{(l' + \frac{1}{2})}{(l' + 1)} \cdot \frac{(l'' + \frac{3}{2})^{2}(l'' + \frac{1}{2})}{(l'' + 1)^{2}(l'' + 2)} \cdot \frac{(l + \frac{3}{2})}{(l + 1)} = 1$$
(D.8)

El límite anterior, involucra un cociente entre el valor de expectación $\langle H_{AH2k} \rangle$, obtenido por un cálculo variacional utilizando la función prueba $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ y la energía exacta del problema hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones pares. Este cociente puede escribirse en términos de la razón entre funciones Γ , \mathcal{W}_l . Observando el límite del cociente anterior y considerando que el límite cuando $l \to \infty$ en \mathcal{W}_l tiende a la unidad, el límite D.8 conduce a la unidad.

A continuación se analizá en caso cuando N es un número impar en D.5.

D.0.2. Dimensiones impares

Para el caso de dimensiones impares donde N = 2k + 1 en D.1, problema hipotético del átomo de hidrógeno, H_{AN} . El cociente D.4 se escribe como:

$$\frac{\langle H_{AH2k+1} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \frac{\{\Gamma(l+k)\Gamma(l+2-k)\}^{2}(l+\frac{3}{2})(l+k)^{2}}{(l+k+\frac{1}{2})(l-k+\frac{3}{2})(l+1)(l+k-\frac{1}{2})^{2}\{\Gamma(l+k-\frac{1}{2})\Gamma(l-k+\frac{3}{2})\}^{2}}$$
(D.9)

Bajo un cambio de variables de la forma l+k=l'+1 y l-k=l'', se reescribe la expresión anterior en término de funciones Γ ,

$$\frac{\langle H_{AH2k+1} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \frac{\Gamma(l'+1)\Gamma(l'+1)}{\Gamma(l'+\frac{1}{2})\Gamma(l'+\frac{3}{2})} \cdot \frac{\Gamma(l''+1)\Gamma(l''+1)}{\Gamma(l''+\frac{1}{2})\Gamma(l''+\frac{3}{2})}$$

$$\cdot \frac{(l'+1)^{2}}{(l'+\frac{3}{2})(l'+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l''+1)^{2}}{(l''+\frac{3}{2})(l''+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l+\frac{3}{2})}{(l+1)}$$
(D.10)

Cuando se considera el límite $l \to \infty$, la razón anterior tiende a la unidad ya que:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{AH2k+1} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l' \to \infty} \frac{\Gamma(l'+1)\Gamma(l'+1)}{\Gamma(l'+\frac{1}{2})\Gamma(l'+\frac{3}{2})} \cdot \frac{\Gamma(l''+1)\Gamma(l''+1)}{\Gamma(l''+\frac{1}{2})\Gamma(l''+\frac{3}{2})}$$

$$\lim_{l \to \infty} \cdot \frac{(l'+1)^{2}}{(l'+\frac{3}{2})(l'+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l''+1)^{2}}{(l''+\frac{3}{2})(l''+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l+\frac{3}{2})}{(l+1)}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \mathcal{W}_{l'} \cdot \frac{(l'+\frac{3}{2})^{2}}{(l'+1)^{2}} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \mathcal{W}_{l''} \cdot \frac{(l''+\frac{3}{2})^{2}}{(l''+1)^{2}}$$

$$\lim_{l \to \infty} \cdot \frac{(l'+1)^{2}}{(l'+\frac{3}{2})(l'+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l''+1)^{2}}{(l''+\frac{3}{2})(l''+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l+\frac{3}{2})}{(l+1)} = 1$$
(D.11)

El límite anterior, involucra un cociente entre el valor de expectación $\langle H_{AH2k+1} \rangle$, obtenido por un cálculo variacional utilizando la función prueba $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ y la energía exacta del problema hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones impares. El límite de este cociente depende de dos razones \mathcal{W}_l . En la siguiente sección se demuestra como utilizando las diferentes propiedades de la función Γ , los límites $\frac{\langle H_{AH2k} \rangle_{min}^l}{E_{0,l}}$ y $\frac{\langle H_{AH2k+1} \rangle_{min}^l}{E_{0,l}}$, es posible derivar el inverso del cuadrado de la fórmula de Wallis y el cuadrado de la fórmula de Wallis, respectivamente.

D.0.3. Wallis y Euler

Para el problema hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones impares, el límite del cociente entre el valor esperado y la energía exacta del problema $\frac{\langle H_{AH2k+1} \rangle_{min}^l}{E_0 l}$, es:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{AH2k+1} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l' \to \infty} \frac{\Gamma(l'+1)\Gamma(l'+1)}{\Gamma(l'+\frac{1}{2})\Gamma(l'+\frac{3}{2})} \cdot \frac{\Gamma(l''+1)\Gamma(l''+1)}{\Gamma(l''+\frac{1}{2})\Gamma(l''+\frac{3}{2})}$$

$$\lim_{l \to \infty} \cdot \frac{(l'+1)^{2}}{(l'+\frac{3}{2})(l'+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l''+1)^{2}}{(l''+\frac{3}{2})(l''+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l+\frac{3}{2})}{(l+1)}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \mathcal{W}_{l'} \frac{(l'+\frac{3}{2})^{2}}{(l'+1)^{2}} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \mathcal{W}_{l''} \frac{(l''+\frac{3}{2})^{2}}{(l''+1)^{2}}$$

$$\lim_{l \to \infty} \cdot \frac{(l'+1)^{2}}{(l'+\frac{3}{2})(l'+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l''+1)^{2}}{(l'''+\frac{3}{2})(l''+\frac{1}{2})} \cdot \frac{(l+\frac{3}{2})}{(l+1)} = 1$$
(D.12)

Simplificando el cociente anterior:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H_{AH2k+1} \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l' \to \infty} \mathcal{W}_{l'} \frac{(l' + \frac{3}{2})^2}{(l' + 1)^2} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \mathcal{W}_{l''} \frac{(l'' + \frac{3}{2})^2}{(l'' + 1)^2}$$
(D.13)

El límite anterior es equivalente a:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l'+1)\Gamma(l'+1)}{\Gamma(l'+\frac{1}{2})\Gamma(l'+\frac{3}{2})} \cdot \frac{\Gamma(l''+1)\Gamma(l''+1)}{\Gamma(l''+\frac{1}{2})\Gamma(l''+\frac{3}{2})} = 1$$
 (D.14)

Del cociente D.14, se puede obtener la fórmula de Wallis y el cuadrado de la misma.

Para obtener la fórmula de Wallis a partir del límite anterior, en la razón de funciones Gamma dependientes de l' se utiliza la fórmula asíntótica de Stirling para la función gamma (lím $_{n\to\infty}$ $\Gamma(n+1)=\sqrt{2\pi}n^{n+\frac{1}{2}}e^{-n}$) y para la razón dependiente de l'' se utilizan las propiedades de la función Gamma: $z\Gamma(z)=\Gamma(z+1)$ y $\Gamma(l+1)=l!$

$$\lim_{l' \to \infty} \frac{\sqrt{2\pi}(l')^{l'+\frac{1}{2}}e^{-l'}}{\sqrt{2\pi}(l'+\frac{1}{2})^{l'+1}e^{-(l'+\frac{1}{2})}} \cdot \frac{\sqrt{2\pi}(l')^{l'+\frac{1}{2}}e^{-l'}}{\sqrt{2\pi}(l'-\frac{1}{2})^{l'}e^{-(l'-\frac{1}{2})}} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \frac{\Gamma(l''+1)\Gamma(l''+1)}{\Gamma(l''+\frac{1}{2})\Gamma(l''+\frac{3}{2})}$$

$$= \lim_{l'' \to \infty} \frac{\Gamma(l''+1)\Gamma(l''+1)}{\Gamma(l''+\frac{1}{2})\Gamma(l''+\frac{3}{2})} = \lim_{l'' \to \infty} \frac{2}{2l''+1} \left[\frac{(l'')(l''-1)...3 \cdot 2 \cdot 1}{\frac{2l''-3}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}} \right]^2 = 1$$
 (D.15)

$$\to \left[\lim_{l'' \to \infty} \prod_{j=1}^{l''} \frac{(2j)(2j)}{(2j-1)(2j+1)} = \frac{\pi}{2} \right]$$

La expresión anterior, fue el resultado que reportó Chaschina y Silagadze a partir de un cálculo variacional utilizando la función prueba $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ en el átomo de hidrógeno en 3 dimensiones. Utilizando la misma función prueba para el problema hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones impares, el límite anterior sigue siendo válido para cualquier valor impar de N y conduce a la fórmula de Wallis.

Por otro lado, para obtener el cuadrado de la fórmula de Wallis, a partir del cociente $\frac{\langle H_{AH2k+1}\rangle_{min}^l}{E_{0,l}} :$

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l'+1)\Gamma(l'+1)}{\Gamma(l'+\frac{1}{2})\Gamma(l'+\frac{3}{2})} \cdot \frac{\Gamma(l''+1)\Gamma(l''+1)}{\Gamma(l''+\frac{1}{2})\Gamma(l''+\frac{3}{2})} = 1$$
 (D.16)

se utilizan las propiedades $z\Gamma(z)=\Gamma(z+1)$ y $\Gamma(l+1)=l!$ en la expresión anterior.

$$\lim_{l' \to \infty} \frac{2}{2l'+1} \left[\frac{(l')(l'-1)...3 \cdot 2 \cdot 1}{\frac{2l'-1}{2} \cdot \frac{2l'-3}{2}...\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}} \right]^{2} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \frac{2}{2l''+1} \left[\frac{(l'')(l''-1)...3 \cdot 2 \cdot 1}{\frac{2l''-1}{2} \cdot \frac{2l''-3}{2}...\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}} \right]^{2}$$

$$\to \lim_{l' \to \infty} \prod_{j=1}^{l'} \frac{(2j)(2j)}{(2j-1)(2j+1)} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \prod_{j=1}^{l''} \frac{(2j)(2j)}{(2j-1)(2j+1)} = \frac{\pi^{2}}{4}$$
(D.17)

Obteniendo el cuadrado de la fórmula de Wallis.

A partir de un cálculo variacional con la función prueba $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ al problema

hipotético del átomo de hidrógeno en dimensiones impares, podemos definir un cociente de la forma $\frac{\langle H_{AH2k+1}\rangle_{min}^l}{E_{0,l}}$, donde obtenemos un cociente de funciones Γ proporcional a W_l , que de acuerdo al uso de sus propiedades, nos permite derivar la fórmula o el cuadrado de la fórmula de Wallis. Este resultado es válido para cualquier valor par de N.

Por otro lado, para dimensiones pares cuando se simplifica el límite $\frac{\langle H_{AH2k}\rangle_{min}^l}{E_{0,l}}$ (ecuación D.8) tenemos:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{\langle H \rangle_{min}^{l}}{E_{0,l}} = \lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l' + \frac{1}{2})\Gamma(l' + \frac{3}{2})}{\Gamma(l' + 1)\Gamma(l' + 1)} \cdot \frac{\Gamma(l'' + \frac{1}{2})\Gamma(l'' + \frac{3}{2})}{\Gamma(l'' + 1)\Gamma(l'' + 1)} = 1$$
 (D.18)

Para obtener la fórmula de Wallis a partir de la expresión anterior, se utiliza la fórmula asintótica de Stirling en el cociente de funciones Γ dependientes de l'. Se utilizan las propiedadeS $z\Gamma(z) = \Gamma(z+1)$ y $\Gamma(l+1) = l!$ en el cociente de funciones Γ dependientes de l'':

$$\left| \lim_{l'' \to \infty} \prod_{j=1}^{l''} \frac{(2j-1)(2j+1)}{(2j)(2j)} = \frac{2}{\pi} \right|$$
 (D.19)

De forma similar, al utilizar únicamente las propiedades de la función Gamma en D.18, se obtiene el cuadrado del inverso de la fórmula de Wallis:

$$\lim_{l' \to \infty} \prod_{j=1}^{l'} \frac{(2j-1)(2j+1)}{(2j)(2j)} \cdot \lim_{l'' \to \infty} \prod_{j=1}^{l''} \frac{(2j-1)(2j+1)}{(2j)(2j)} = \frac{4}{\pi^2}$$
 (D.20)

Para concluir el presente apéndice, se comenta la relación entre e y π reportada por Ali Sanayei [34] donde derivan el número e a partir de la fórmula de Wallis. Es posible llegar a la definción matemática del número de Euler, a partir del cociente W_l . A continuación se demuestra esta relación:

$$\lim_{l \to \infty} \frac{2}{2l+3} \left[\frac{(l+1)(l)(l-1)...3 \cdot 2 \cdot 1}{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{2l-3}{2} \cdot \frac{2l-3}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\pi}} \right]^{2} = \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^{2}}{(l+\frac{3}{2})} \left[\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \right]^{2}$$

$$= \lim_{l \to \infty} W_{l}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{(l+1)^{2}}{(l+\frac{3}{2})^{2}} \lim_{l \to \infty} \frac{\Gamma(l+1)\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})\Gamma(l+\frac{1}{2})}$$

$$= \lim_{l \to \infty} \frac{1}{l+\frac{1}{2}} \left[\frac{l^{l+\frac{1}{2}}e^{-l}}{(l-\frac{1}{2})^{l}e^{-l+\frac{1}{2}}} \right]^{2} = 1$$

$$\Rightarrow \lim_{l \to \infty} (1+\frac{1}{l})^{l} = e$$

Se observa que dicha relación entre π y e existe debido al cociente W_l . A partir del cociente de funciones Γ en W_l , se puede derivar la fórmula de Wallis para π o, la definición formal del número de Euler, dependiendo de como se utilicen las propiedades de la función especial.

De forma análoga, para los casos donde tenemos el cociente \mathcal{W}_l^{-1} , obtenemos el recíproco del número de Euler:

$$\lim_{l^* \to \infty} \left[\frac{(2l^* - 1) \cdot (2l^* - 3) \cdot (2l^* - 5) \dots 3 \cdot 1}{2l^* \cdot (2l^* - 2) \cdot (2l^* - 4) \dots 6 \cdot 4 \cdot 2} \right]^2 \frac{(2l^* + 1)^2}{2l^* + 2} \frac{\pi}{2} = \lim_{l^* \to \infty} \left[\frac{\Gamma(l^* + \frac{1}{2})}{\Gamma(l^* + 1)} \right]^2 \frac{(l^* + \frac{1}{2})^2}{l^* + 1}$$

$$= \lim_{l^* \to \infty} \frac{l^* + \frac{1}{2}}{l^* + 1} \lim_{l^* \to \infty} \frac{\Gamma(l^* + \frac{3}{2})}{\Gamma(l^* + 1)} \frac{\Gamma(l^* + \frac{1}{2})}{\Gamma(l^* + 1)}$$

$$= \lim_{l^* \to \infty} \frac{1}{W_{l^*}} \frac{(l^* + 1)^2}{(l^* + \frac{3}{2})^2}$$

$$= \lim_{l^* \to \infty} (l^* + \frac{1}{2}) \left\{ \frac{(l^* - \frac{1}{2})^l e^{-l^* + \frac{1}{2}}}{l^{*l^* + \frac{1}{2}} e^{-l^*}} \right\}^2 = 1$$

$$\Rightarrow \lim_{l^* \to \infty} (1 + \frac{1}{l^*})^{-l^*} = \frac{1}{e}$$
(D.22)

De los dos límites anteriores D.21 y D.22, se demuestra como el límite del cociente W_l permite llegar a una derivación para la fórmula de Wallis para π , además de dar una derivación para el número de Euler y corroborar una conexión entre estas dos constantes. Ya que la razón W_l está presente en cada uno de los cocientes entre el valor esperado de un problema y su solución exacta, es posible derivar el número de Euler en diferentes problemas de campo central *i.e.*, átomo de hidrógeno, potencial quark-antiquark e incluso es posible derivar esta expresión matemática a partir del comportamiento asintótico de la ecuación de Nikiforov-Uvarov. Cuando el cociente entre estas dos soluciones involucra dos razones W_l es posible derivar la fórmula de Wallis, el cuadrado de la misma, el número de Euler, el cuadrado del número de Euler y los recíprocos de cada una de estas fórmulas.

Cuando utilizamos la función prueba $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ para un cálculo variacional para alguno de los potenciales quark-antiquark o Pöschl-Teller, en el valor de expectación resultante dependiente del parámetro α se obtiene un cociente tipo \mathcal{W}_l . De este valor esperado, no es posible determinar el parámetro α que da la menor energía del problema.

Pero considerando el comportamiento asintótico de la ecuación de Nikiforov-Uvarov, y utilizando la función prueba $R_{n,l}(r) = \frac{r^l}{(\alpha^2 + r^2)^{l+1}}$ para un cálculo variacional en los potenciales quark-antiquark o Pöschl-Teller, se obtiene el cociente $\frac{SU}{T^2} = \frac{1}{4} \left[\frac{\Gamma(l+\frac{3}{2} - \frac{N}{2})\Gamma(l+\frac{5}{2} + \frac{N}{2})}{\Gamma(l+1-\frac{N}{2})\Gamma(l+1+\frac{N}{2})} \right]^2$. Dependiendo si N es par o impar, se obtiene una derivación de la fórmula de Wallis o el inverso de la misma (así como sus respectivos cuadrados).